



**FORUM GURU BESAR**  
INSTITUT TEKNOLOGI BANDUNG



# **Orasi Ilmiah Guru Besar Institut Teknologi Bandung**



## **KOMPUTASI DIVAIS DAN MATERIAL ELEKTRONIK UNTUK PENGEMBANGAN DIVAIS DAN MATERIAL MAJU**

**Profesor Fatimah Arofiati Noor**

Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam  
Institut Teknologi Bandung

**Aula Barat ITB  
18 Mei 2024**



Orasi Ilmiah Guru Besar  
Institut Teknologi Bandung

**KOMPUTASI DIVAIS DAN MATERIAL  
ELEKTRONIK UNTUK PENGEMBANGAN  
DIVAIS DAN MATERIAL MAJU**



Orasi Ilmiah Guru Besar  
Institut Teknologi Bandung

# **KOMPUTASI DIVAIS DAN MATERIAL ELEKTRONIK UNTUK PENGEMBANGAN DIVAIS DAN MATERIAL MAJU**

**Prof. Fatimah Arofiati Noor**

18 Mei 2024  
Aula Barat ITB



Hak cipta © pada penulis dan dilindungi Undang-Undang

Hak penerbitan pada ITB Press

Dilarang memperbanyak sebagian atau seluruh bagian dari buku ini tanpa izin dari penerbit

*Orasi Ilmiah Guru Besar Institut Teknologi Bandung:*

**KOMPUTASI DIVAIS DAN MATERIAL ELEKTRONIK UNTUK  
PENGEMBANGAN DIVAIS DAN MATERIAL MAJU**

Penulis : Prof. Fatimah Arofiati Noor

Reviewer : Prof. Khairurrijal

Editor Bahasa : Rina Lestari

Cetakan I : 2024

ISBN : 978-623-297-444-9

e-ISBN : 978-623-297-445-6 (PDF)



© Gedung STP ITB, Lantai 1,  
Jl. Ganesa No. 15F Bandung 40132  
☎ +62 22 20469057  
🌐 www.itbpress.id  
✉ office@itbpress.id  
Anggota Ikapi No. 043/JBA/92  
APPTI No. 005.062.1.10.2018

# PRAKATA

Bismillaahirrahmaanirrahiim

Alhamdulillahirobbil 'aalamiin, segala puji dan syukur bagi Allah Swt., Tuhan Yang Maha Esa, Mahakuasa, serta pencipta dan pemilik alam semesta. Penulis bersyukur atas rahmat, karunia, dan izin-Nya sehingga dapat menyelesaikan buku orasi ilmiah. Penulis mengucapkan terima kasih dan penghargaan kepada Forum Guru Besar ITB atas kesempatan yang diberikan dalam penyusunan buku ini yang disampaikan dalam acara orasi ilmiah Guru Besar. Selain itu, penulis mengucapkan terima kasih dan penghargaan kepada seluruh pihak yang membantu dan mendukung penyelesaian karya ini.

Buku ini memaparkan hasil penelitian tentang simulasi material dan divais elektronik yang menampilkan penggunaan metode komputasi untuk menyelesaikan beberapa permasalahan fisis. Saat ini, metode komputasi berkembang dengan pesat dan menjadi pendukung utama metode eksperimen. Buku ini membahas pentingnya metode komputasi divais dan material dan memfokuskan pada bagaimana pendekatan komputasi dalam menyelesaikan permasalahan fisis.

Penulis berharap semoga tulisan ini dapat menjadi sumber inspirasi, menambah wawasan baru, dan membangkitkan semangat para peneliti dalam menghadapi tantangan penelitian di masa depan. Penulis yakin bahwa banyak peneliti yang dapat menghasilkan terobosan besar dan memberikan manfaat bagi kemajuan pengetahuan dan teknologi yang akan berdampak pada kesejahteraan manusia.

Akhir kata, penulis ucapkan terima kasih kepada semua pihak yang telah memberikan masukan, inspirasi, dukungan, dan bantuan sehingga buku ini dapat selesai ditulis sesuai harapan.

Bandung, 18 Mei 2024

Prof. Fatimah Arofiati Noor





# SINOPSIS

Tulisan ini membahas tentang penggunaan metode komputasi divais dan material untuk menyelesaikan beberapa permasalahan fisis. Akibat perkembangan teknologi dan ilmu pengetahuan, metode komputasi berkembang dengan pesat dan menjadi pendukung utama metode eksperimen dalam menyelesaikan permasalahan fisis. Pada bagian awal disampaikan pentingnya metode komputasi divais dan material. Di samping itu, bagaimana pendekatan komputasi divais dan material dalam menyelesaikan problem fisis juga dibahas.

Selanjutnya pembahasan difokuskan pada penggunaan komputasi divais untuk mengoptimasi kinerja MOSFET. Pembahasan ini diawali dengan menjelaskan konsep dasar MOSFET secara umum dan tantangan yang dihadapi dalam pengembangan teknologi MOSFET baik itu dalam hal kecepatan kinerja ataupun penskalaan. Tantangan terbesar yang muncul adalah adanya kebocoran arus akibat proses penskalaan yang sudah mencapai batas maksimum. Oleh sebab itu, perlu dilakukan rekayasa struktur divais baik itu dalam hal pencarian material baru maupun optimasi parameter kinerja. Untuk memahami pengaruh optimasi tersebut, kami mengembangkan perumusan analitik yang sederhana dan efisien dalam memodelkan transmitansi elektron serta arus terobosan. Hingga akhirnya, kami juga mengulas pengembangan model analitik untuk mempelajari karakteristik unik dari *cylindrical surrounding-gate* (SG) MOSFET yang merupakan kandidat FET masa depan

Berikutnya, aplikasi dari komputasi material untuk mempelajari mekanisme penumbuhan grafena dipaparkan secara detail. Paparan ini diawali dengan penguraian beberapa permasalahan dalam proses penumbuhan grafena pada katalis paduan berbasis Cu dan peran yang dapat diambil oleh komputasi material berbasis DFT dalam menyelesaikan permasalahan tersebut. Selanjutnya, dipaparkan hasil penelitian studi komputasi pengaruh jenis atom pepadu dan konsentrasi atom paduan terhadap mekanisme penumbuhan grafena. Kedua parameter tersebut ternyata sangat berpengaruh dalam mengendalikan mekanisme penumbuhan. Pada bagian akhir dituliskan riset lanjutan yang akan

dikembangkan berkaitan dengan metode komputasi material dan divais elektronik.

# DAFTAR ISI

PRAKATA.....	v
SINOPSIS .....	vii
DAFTAR ISI.....	ix
DAFTAR GAMBAR.....	xi
DAFTAR TABEL.....	xiii
1 PENDAHULUAN.....	1
2 SIMULASI DIVAIS ELEKTRONIK PADA MOSFET .....	3
2.1 MOSFETs.....	3
2.2 Penskalaan MOSFETs dan Tantangannya .....	4
2.3 Optimasi Kinerja MOSFETs.....	7
2.4 Desain <i>Cylindrical Surrounding-Gate</i> (SG) MOSFET .....	11
3 SIMULASI MATERIAL ELEKTRONIK PADA PENUMBUHAN GRAFENA.....	21
3.1 Urgensi Simulasi Penumbuhan Grafena .....	21
3.2 Pengaruh Jenis Atom M (M=Co, Ni) Terhadap Mekanisme Penumbuhan Grafena pada Katalis Paduan Cu-M(111) .....	24
3.3 Pengaruh Fraksi Atom Ni Terhadap Mekanisme Penumbuhan Grafena pada Katalis Paduan Cu-Ni (111) .....	31
4 PENUTUP DAN Riset LANJUTAN .....	39
UCAPAN TERIMA KASIH .....	41
DAFTAR PUSTAKA .....	43
CURRICULUM VITAE .....	49



# DAFTAR GAMBAR

<b>Gambar 1.</b>	Pohon keluarga dari <i>field-effect transistor</i> (FET) (Sze dan Ng, 2006). ....	3
<b>Gambar 2.</b>	Hukum Moore yang menjadi panduan perkembangan jumlah transistor dalam IC (Packan, 1999). ....	5
<b>Gambar 3.</b>	(a) Skematik MOSFET yang memiliki tiga terminal, dan (b) diagram pita dari MOSFET. ....	5
<b>Gambar 4.</b>	Diagram pita energi struktur MOSFET $\text{TiN}_x/\text{HfSiO}_x\text{N}/\text{SiO}_2/\text{p-Si}$ (Noor dkk., 2010). ....	8
<b>Gambar 5.</b>	(a) Transmittansi elektron sebagai fungsi sudut datang elektron, dan (b) Sistem koordinat yang digunakan dalam kalkulasi ini (Noor dkk., 2015). ....	8
<b>Gambar 6.</b>	(a) Transmittansi dan (b) densitas arus terobosan elektron pada kapasitor MOS yang dikalkulasi tanpa dan dengan mempertimbangkan efek kopling dari energi kinetik transversal dan longitudinal (Noor dkk., 2010b). ....	9
<b>Gambar 7.</b>	(a) Kerapatan arus terobosan dari kapasitor MOS sebagai fungsi ketebalan oksida ekuivalen dan (b) Kerapatan arus terobosan dari kapasitor MOS pada orientasi substrat yang berbeda (Noor dkk., 2012). ....	10
<b>Gambar 8.</b>	(a) Skema penampang melintang dan (b) diagram pita energi dari SG MOSFET sepanjang pemotongan tegak lurus saluran (Noor dkk., 2019). ....	12
<b>Gambar 9.</b>	(a) potensial permukaan dan sentral, serta (b) tingkat energi dari SG MOSFET dengan <i>silicon body</i> beradius 4 nm dan ketebalan oksida 1 nm (Noor dkk., 2019). ....	14
<b>Gambar 10.</b>	Arus terobosan <i>gate</i> sebagai fungsi tegangan <i>gate</i> dari SG MOSFET dengan berbagai jari-jari dan ketebalan oksida (Noor dkk., 2019). ....	15
<b>Gambar 11.</b>	(a) Susunan GaN NW yang difabrikasi dengan fotolitografi dan teknik <i>hibrid etching</i> , (b) proses pengisian resis untuk membuat kontak, (c) penampang melintang citra SEM dan (d) sketsa 2-D dari transistor berbasis GaN NW (Noor dkk., 2021). ....	16

<b>Gambar 12.</b>	Karakteristik Id-Vds dari divais (a) GaN-FET <sub>SiO<sub>2</sub></sub> , dan (b) GaN-FET <sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub> (Noor dkk., 2021). .....	19
<b>Gambar 13.</b>	Hasil fitting dari Id dan G0 dengan variasi diameter untuk data eksperimen GaN-FET <sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub> (Noor dkk., 2021).....	20
<b>Gambar 14.</b>	Struktur kristal model katalis Cu(111) (a) tampak samping dan (b) tampak atas (Yutomo dkk., 2022). .....	23
<b>Gambar 15.</b>	Kemungkinan <i>site</i> adsorpsi spesies sumber karbon di (a,c,e) permukaan dan (b,d,f) sub-permukaan katalis (a,b) Cu, (c,d) Cu-Co, dan (e,f) Cu-Ni (Yutomo dkk., 2023). .....	25
<b>Gambar 16.</b>	Energi bebas Gibbs ( $\Delta G_{ads}$ ) adsorpsi sebagai fungsi pH <sub>2</sub> dari spesies sumber karbon pada katalis (a) Cu, (b) Cu-Co, dan (c) Cu-Ni (T diatur pada 1000°C). Energi bebas Gibbs adsorpsi ( $\Delta G_{ads}$ ) sebagai fungsi T dari spesies sumber karbon pada katalis (d) Cu, (e) Cu-Co, dan (f) Cu-Ni (pH <sub>2</sub> diatur pada 10–2 Torr) ( Yutomo dkk., 2023).....	29
<b>Gambar 17.</b>	Profil energi dari difusi monomer C pada katalis (a,d) Cu, (b,e) Cu-Co, dan (c,f) Cu-Ni (Yutomo dkk., 2023).....	30
<b>Gambar 18.</b>	Tampak atas dari kemungkinan <i>site</i> adsorpsi di permukaan katalis (a) Cu murni, (b) Cu-Ni-1, (c) Cu-Ni-2, dan (d) Cu-Ni-3 (Yutomo dkk., 2022).....	32
<b>Gambar 19.</b>	Energi adsorpsi terendah dari spesies sumber karbon di atas permukaan katalis Cu-Ni (Yutomo dkk., 2022). .....	33
<b>Gambar 20.</b>	(a) <i>Site</i> oktahedral (octa) yang mungkin dan (b) energi adsorpsi minimum dari adsorpsi spesies monomer C pada sub-permukaan dari katalis Cu dan Cu-Ni (Yutomo dkk., 2022). .....	33
<b>Gambar 21.</b>	Populasi relatif dari spesies sumber karbon pada katalis Cu, Cu-Ni-1, Cu-Ni-2, dan Cu-Ni-3 pada berbagai variasi temperatur: (a) 600 °C, (b) 800 °C, (c) 1000 °C, dan (d) 1200 °C (Yutomo dkk., 2022).....	35
<b>Gambar 22.</b>	Profil energi dari difusi monomer C pada katalis (a,d) Cu, (b,e) Cu-Ni-1, dan (c,f) Cu-Ni-3 (Yutomo dkk., 2022). .....	37

# DAFTAR TABEL

<b>Tabel 1.</b> Energi adsorpsi ( $E_{ads}$ ) dan jarak setimbang ( $Z_A$ ) spesies sumber karbon di permukaan dan sub-permukaan katalis Cu (Yutomo dkk., 2022). .....	26
<b>Tabel 2.</b> Energi adsorpsi $E_{ads}$ minimum dan <i>site</i> terkait dari spesies sumber karbon di permukaan dan sub-permukaan katalis Cu-M (M=Co, Ni) dengan konsentrasi M adalah 18,75% (Yutomo dkk., 2023). .....	27





# 1 PENDAHULUAN

Dewasa ini, ilmu komputasi telah muncul sebagai mitra yang kuat untuk studi eksperimen dan teoretis. Dipercepat oleh peningkatan teknologi komputer dan kemunculan metode-metode komputasi yang baru, ilmu komputasi menjadi salah satu cabang ilmu sains yang berkembang dengan pesat. Dalam perjalanan menuju masa depan yang semakin cerdas dan terhubung, komputasi material dan divais elektronik telah menduduki tempat sentral sebagai alat yang memungkinkan para ilmuwan dan insinyur untuk menggali kompleksitas material dan merancang perangkat elektronik dengan akurasi tinggi dan efisiensi yang belum pernah terjadi sebelumnya.

Material adalah pondasi dari semua perangkat elektronik. Bagaimana atom-atom dalam sebuah bahan berinteraksi satu sama lain akan memengaruhi sifat-sifatnya. Komputasi material memungkinkan ilmuwan untuk memasuki dunia elektron dan atom. Dengan menggunakan metode komputasi skala elektronik atau atomik, para ilmuwan dapat memprediksi sifat-sifat dasar suatu material misalnya sifat listrik, magnet, optik, dan termoelektrik. Bahkan, komputasi material dapat digunakan untuk mempelajari proses material. Dalam beberapa kasus, pendekatan komputasi dapat menjadi jalan satu-satunya untuk mempelajari respons material dalam kondisi ekstrim yang tidak dapat dilakukan dalam laboratorium, misalnya kondisi tekanan tinggi, temperatur tinggi, kontaminan zat berbahaya, dan radiasi nuklir. Sebagai contoh, perubahan sifat sebuah metal atau keramik dalam proses *sintering* yang normalnya dipelajari menggunakan *furnace* di laboratorium dan perangkat karakterisasi pendukung dapat juga dipelajari dengan menggunakan metode komputasi material dalam skala atomik. Dengan menggunakan berbagai macam *input* kondisi lingkungan termasuk temperatur yang tinggi, semua karakteristik fisika dan kimia dapat diketahui jika simulasi dijalankan dengan prosedur yang benar.

Di samping komputasi material, komputasi divais elektronik juga memiliki prospek yang sangat besar. Transistor, diode, sensor, dan perangkat elektronik lainnya adalah jantung dari perangkat modern. Mempelajari bagaimana merancang, mengoptimalkan, dan menyimulasikan kinerja perangkat tersebut merupakan kunci dalam pengembangan teknologi terbaru. Dengan menggunakan komputasi divais elektronik, para ilmuwan dapat menghindari pembuatan prototipe fisik yang mahal dan memakan

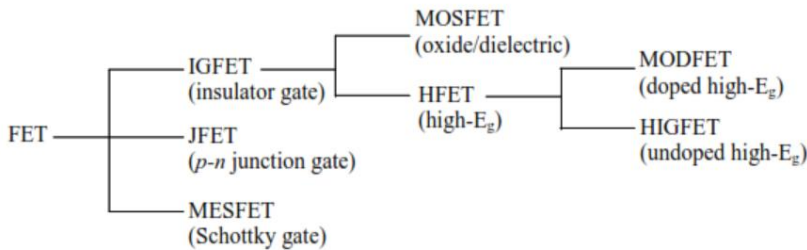
waktu. Sebaliknya, mereka dapat menguji desain mereka secara komputasi, menghemat waktu dan biaya pengembangan yang signifikan. Pengujian virtual ini memungkinkan untuk mengidentifikasi masalah potensial, memperbaiki desain, dan menguji berbagai skenario tanpa harus membuat prototipe fisik setiap kali. Komputasi divais elektronik dapat membantu dalam menggali berbagai konfigurasi dan desain, untuk dapat menentukan kombinasi terbaik dari komponen elektronik untuk mencapai efisiensi dan kinerja yang maksimal. Hal ini memastikan bahwa perangkat yang diproduksi memiliki kualitas yang tinggi dan memenuhi standar yang diperlukan.

Melihat potensi yang besar dari bidang komputasi material dan divais elektronik, tulisan ini akan memaparkan beberapa pekerjaan penulis yang secara konsisten menekuni bidang tersebut. Pada bagian pertama akan dipaparkan upaya optimasi kinerja *metal oxide-semiconductor field effect transistors* (MOSFETs) menggunakan pendekatan komputasi divais elektronik. Sedangkan, pada bagian kedua akan dipaparkan metode komputasi material yang digunakan untuk mempelajari mekanisme penumbuhan grafena.

## 2 SIMULASI DIVAIS ELEKTRONIK PADA MOSFET

### 2.1 MOSFETs

*Field-effect transistor* (FET) merupakan divais yang paling penting untuk *integrated circuit* (IC) berdensitas tinggi seperti mikroprosesor dan memori. Prinsip kerja dari *field-effect transistor* (FET) pertama kali diusulkan pada tahun 1930 oleh Lilienfeld dan Heil (Sze dan Ng, 2006). *Metal-oxide semiconductor field-effect transistor* (MOSFET) adalah komponen utama dan yang paling populer pada keluarga FET. FET dibagi menjadi tiga kelompok berdasarkan sejarah dari pembentukan kapasitor *gate*, yaitu: IGFET (*insulated-gate* FET), JFET (*junction* FET), dan MESFET (*metal-semiconductor* FET) seperti yang diilustrasikan pada Gambar 1.



**Gambar 1.** Pohon keluarga dari *field-effect transistor* (FET) (Sze dan Ng, 2006).

*Gate* pada IGFET adalah insulator, sedangkan pada JFET atau MESFET, kapasitor *gate* terbuat dari lapisan sambungan p-n atau *Schottky barrier*. IGFET dibagi lebih lanjut menjadi *MOSFET/MISFET* (*metal-insulator-semiconductor* FET) dan HFET (*heterojunction* FET). Dalam MOSFET, secara spesifik insulatornya adalah lapisan oksida terdeposisi, sedangkan dalam MISFET, insulatornya adalah lapisan dielektrik. Pada cabang HFET, material *gate* adalah lapisan semikonduktor dengan energi *gap* tinggi.

FET menyediakan banyak sifat menarik untuk dimanfaatkan sebagai *switching* analog seperti *amplifier* impedansi masukan tinggi, *amplifier* gelombang mikro, dan sirkuit terpadu digital. Dibanding dengan transistor bipolar, FET memiliki impedansi *input* yang tinggi sehingga cocok dengan standar sistem gelombang mikro. Pada tingkatan arus yang tinggi, FET mempunyai koefisien temperatur negatif sehingga arus akan turun sebagai efek dari peningkatan temperatur. Kondisi ini menyebabkan distribusi

temperatur pada divais menjadi lebih seragam sehingga terhindar dari kehilangan termal dan kerusakan lanjutan yang mungkin dapat terjadi pada bipolar transistor. Divais FET stabil secara termal, bahkan ketika area aktifnya besar atau ketika banyak divais dihubungkan secara melintang. FET tidak mengalami penyimpanan pembawa muatan minoritas karena tidak ada sambungan p-n bias maju, sehingga memiliki kecepatan peralihan sinyal yang lebih tinggi (Sze dan Ng, 2006).

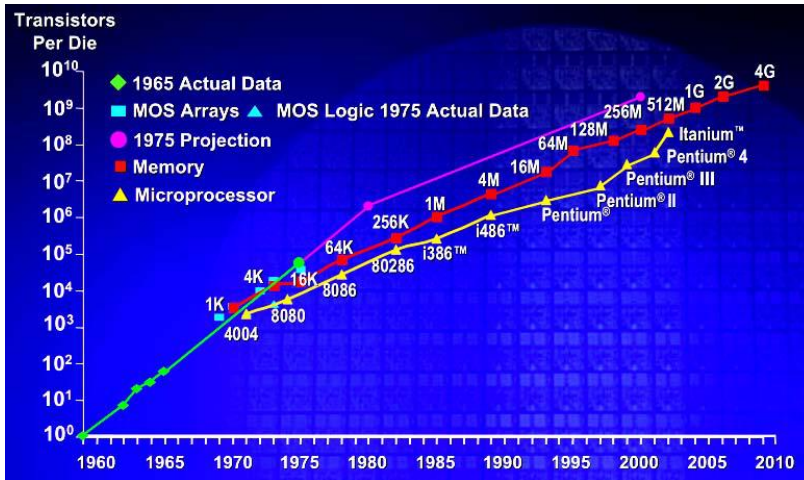
Reduksi dimensi *gate* dari divais FET dalam produksi IC telah dilakukan sejak tahun 1970. Dimensi terus direduksi pada kecepatan yang stabil dan akan berlanjut di masa yang akan datang. Reduksi dimensi divais sangat ditentukan oleh dua prasyarat, yaitu performa dan densitas. Jumlah komponen per IC telah meningkat secara eksponen. Dikarenakan tantangan peningkatan teknologi dan biaya fabrikasi, diprediksi laju peningkatan akan turun. Namun, satu juta divais atau lebih per cip telah berhasil dicapai pada tahun 2000 dengan teknologi 0,1  $\mu\text{m}$ .

## 2.2 Penskalaan MOSFETs dan Tantangannya

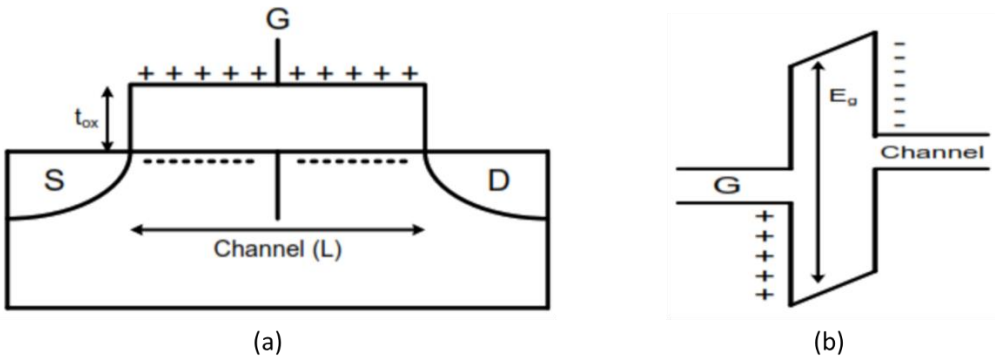
Sejak tahun 1965, Gordon Moore mengamati bahwa jumlah transistor per  $\text{inch}^2$  pada IC meningkat dua kali lipat setiap tahunnya. Moore memprediksi tren ini akan terus berlangsung. Meskipun pada tahun-tahun berikutnya perkembangannya sedikit melambat, namun kepadatan meningkat dua kali lipat setiap 18 bulan dan ini adalah definisi terbaru dari Hukum Moore. Dalam beberapa tahun terakhir, penskalaan hukum Moore pada teknologi metal-oxide-semiconductor (MOS) masih tetap berjalan dengan kecepatan seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 2. Secara khusus, silikon dioksida ( $\text{SiO}_2$ ) sebagai bahan dielektrik *gate* diprediksi akan mencapai batas penskalaan, sehingga memberikan tantangan besar untuk melanjutkan pengembangan MOSFET (Packan, 1999).

MOSFET terdiri atas tiga terminal yaitu: *drain* (D), *source* (S) yang terkoneksi atau terisolasi akibat tegangan yang diaplikasikan pada terminal *gate* (G). Seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 3 (a), proses *switching* dapat berlangsung melalui pemanfaatan kapasitor *gate*. Muatan positif dan negatif terbentuk pada sepanjang saluran kapasitor *gate* dan dipengaruhi oleh polaritas tegangan yang bekerja pada terminal *gate*. Muatan pada saluran *gate*

dapat menghubungkan atau mengisolasi terminal *drain* dan *source* bergantung pada tipe muatan di saluran *gate*.



**Gambar 2.** Hukum Moore yang menjadi panduan perkembangan jumlah transistor dalam IC (Packan, 1999).



**Gambar 3.** (a) Skematik MOSFET yang memiliki tiga terminal, dan (b) diagram pita dari MOSFET.

Beberapa sifat dari material dielektrik *gate*, misalnya  $\text{SiO}_2$ , berpengaruh pada pengoperasian MOSFET. Muatan pada *gate* dan daerah *channel* terisolasi secara elektrik oleh energi gap ( $E_g$ ) dari  $\text{SiO}_2$ , seperti yang ditunjukkan pada Gambar 3 (b). Selain itu, antarmuka antara  $\text{SiO}_2$  dan substrat Si di bawahnya harus memiliki kualitas yang baik secara elektrik, sehingga memungkinkan garis medan listrik yang tercipta di elektroda *gate* menyusup ke wilayah saluran untuk mengakumulasi atau membalikkan muatan permukaan

(Kawamoto dkk., 2001). Muatan yang diinduksi,  $Q$ , pada *channel* diberikan oleh,

$$Q = C_{ox}V, \quad (1)$$

di mana  $V$  adalah tegangan kapasitor *gate* dan  $C_{ox}$  adalah kapasitansi kapasitor *gate*, yang dapat dimodelkan sebagai kapasitor plat sejajar:

$$C_{ox} = \frac{\kappa_{ox}\epsilon_0}{t_{ox}}. \quad (2)$$

Di mana  $\kappa_{ox}$ ,  $\epsilon_0$ , dan  $t_{ox}$  adalah konstanta dielektrik relatif, permitivitas dari ruang hampa, dan ketebalan dari material dielektrik. Arus *drain-source* untuk MOSFET dapat dituliskan dengan,

$$I_{ds} = \frac{1}{2}\mu C_{ox} \frac{W}{L} (V_{gs} - V_{th}). \quad (3)$$

Di mana  $\mu$  adalah mobilitas *channel*,  $W$  adalah lebar *channel*,  $L$  adalah panjang *channel*,  $V_{gs}$  adalah potensial *gate-source*, dan  $V_{th}$  adalah tegangan ambang (*threshold voltage*). Dari Persamaan (2) dan (3), dapat diketahui bahwa arus yang mengalir antara *drain* dan *source* meningkat ketika dimensi lateral ( $L$ ) dan vertikal ( $t_{ox}$ ) dari divais direduksi. Untuk meningkatkan performa, MOSFET secara intensif telah diperkecil hingga skala sub-mikron, dan sebagai konsekuensinya dimensi dari terminal *gate*  $\text{SiO}_2$  akan berada pada skala sub-nano. Kebocoran arus yang besar akan terjadi dan kehilangan daya akan menjadi signifikan ketika dimensi *gate* kurang dari 1,5 nm (Kawamoto dkk., 2001).

Sebagai solusi dalam mereduksi kebocoran arus, upaya pertama difokuskan pada pengembangan material dielektrik dengan konstanta dielektrik ( $k$ ) yang tinggi untuk terminal *gate*. Material dielektrik dengan  $k$  yang tinggi didefinisikan sebagai material dielektrik yang nilai  $k$  nya lebih tinggi dari  $\text{SiO}_2$ . Ide dasar dalam menggunakan material dengan  $k$  tinggi adalah dengan meningkatkan ketebalan dari *gate* agar kebocoran arus tereduksi. Di sisi lain, kapasitansi meningkat sesuai yang dideskripsikan sebagai berikut:

$$C_{High-k} = \frac{\epsilon_0 \kappa_{High-k}}{t_{High-k}}. \quad (4)$$

Dengan kapasitansi *gate* dijaga konstan, dari Persamaan (2) dan (4), maka diperoleh sebagai berikut:

$$t_{High-k} = \frac{\kappa_{High-k}}{\kappa_{ox}} t_{ox}. \quad (5)$$

Persamaan (5) sering diekspresikan dalam bentuk ketebalan ekuivalen oksida (EOT) yang didefinisikan sebagai ketebalan dari SiO<sub>2</sub> yang menyediakan kapasitansi *gate* yang sama dengan material *k* tinggi, sebagai berikut:

$$EOT = t_{ox} = \frac{\kappa_{ox}}{\kappa_{High-k}} t_{High-k}. \quad (6)$$

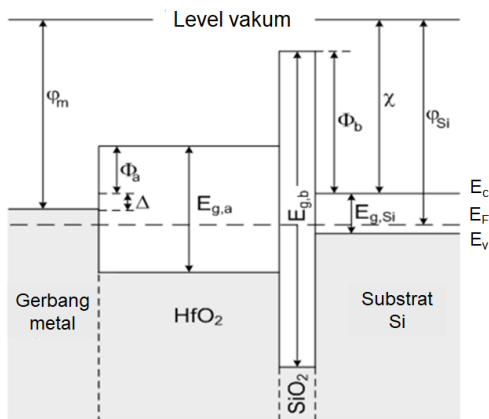
Pada beberapa tahun terakhir, banyak material dielektrik *k* tinggi yang telah dipelajari untuk menggantikan SiO<sub>2</sub> seperti ZrO<sub>2</sub>, Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, HfO<sub>2</sub>, Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, TiO<sub>2</sub>, SrTiO<sub>3</sub>, Lu<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (Copel dkk., 2000; Ferrari dkk., 2007; Green dkk., 2001). Oksida berbasis Hf menunjukkan potensi terbaik daripada kandidat lain yang tersedia karena baiknya sifat dielektrik, dan kestabilan termal yang baik ketika membentuk antarmuka dengan substrat silikon (Gusev dkk., 2003; Kim dkk., 2005). Secara kusus, Hf-Silikat dan paduan nitridanya memiliki konstanta dielektrik yang cukup tinggi, yaitu 8-15, serta memiliki kestabilan termal tinggi, karakteristik kebocoran yang lebih baik, dan kecepatan degradasi yang lebih rendah dari HfO<sub>2</sub> (Chowdhury dan Misra, 2007). Karena alasan ini, Hf-silikat diprediksi lebih menjanjikan sebagai pengganti SiO<sub>2</sub>.

### 2.3 Optimasi Kinerja MOSFETs

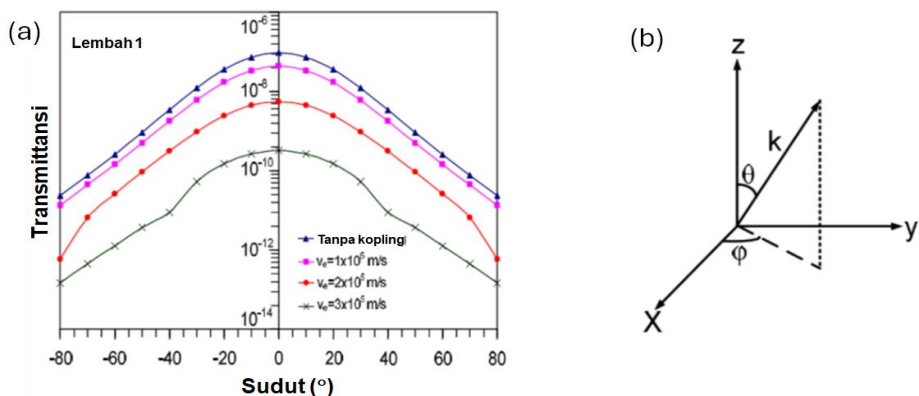
Dalam beberapa tahun terakhir, kami aktif menggunakan komputasi divais elektronik untuk mengoptimasi kinerja MOSFETs. Hal ini dilakukan dengan mempelajari transmitansi elektron serta arus terobosan yang melewati lapisan antarmuka antara lapisan dielektrik dengan lapisan MOS (Noor dkk., 2010a; Noor dkk., 2010b; Noor dkk., 2010c; Noor dkk., 2012; Noor, dkk., 2014a; Noor dkk., 2014b; Noor dkk., 2015). Studi ini dilakukan dengan pendekatan analitik (pendekatan fungsi gelombang Airy) maupun numerik (metode transfer matrik) yang diawali dengan mengekspresikan transmitansi elektron di bawah efek kopling antara gerak longitudinal dan transversal serta massa

anisotropik. Setelah itu, transmitansi yang diperoleh digunakan untuk menghitung arus terobosan.

Hasil kalkulasi arus terobosan kemudian dibandingkan dengan hasil eksperimen dengan menggunakan beberapa parameter fitting. Akhirnya, parameter fitting digunakan untuk menghitung transmitansi dan arus terobosan sebagai fungsi kecepatan fasa elektron pada *gate* metal, sudut datang elektron, dan ketebalan oksida ekuivalen. Pada pembahasan ini, struktur kapasitor  $TiN_x/HfSiO_xN/SiO_2/p-Si$  digunakan sebagai fokus kajian, dengan diagram pita energi seperti yang ditunjukkan pada Gambar 4.  $TiN_x$  dipilih karena memiliki titik lebur yang tinggi, konduktivitas termal yang tinggi, keras dan sifat anti korosif yang baik sehingga cocok untuk *gate* metal pada MOS (Mizuno dkk., 2005).



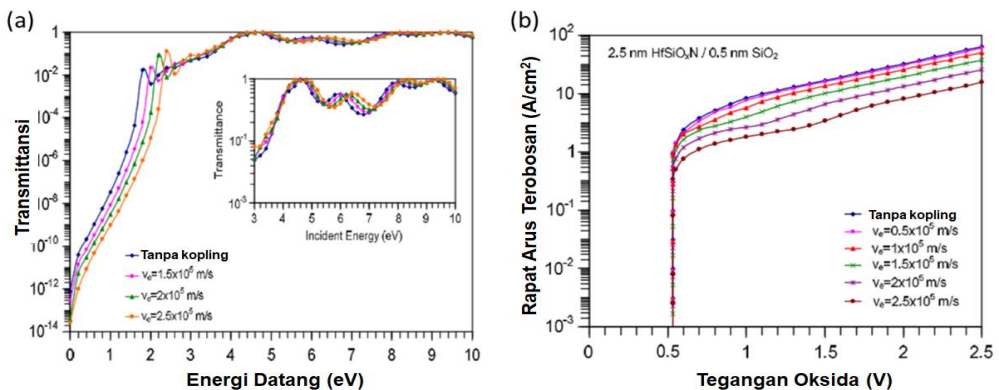
Gambar 4. Diagram pita energi struktur MOSFET  $TiN_x/HfSiO_xN/SiO_2/p-Si$  (Noor dkk., 2010).



Gambar 5. (a) Transmitansi elektron sebagai fungsi sudut datang elektron, dan (b) Sistem koordinat yang digunakan dalam kalkulasi ini (Noor dkk., 2015).



Gambar 5 (a) menunjukkan transmitansi elektron sebagai fungsi sudut datang elektron terhadap penghalang pada rentang  $-80^\circ$  hingga  $80^\circ$ . Dalam kalkulasi ini, tebal lapisan  $\text{HfSiO}_x\text{N}$  dan  $\text{SiO}_2$  berturut-turut diatur sebesar 2,5 nm dan 0,5 nm, selanjutnya efek kopling energi kinetik transversal dan longitudinal juga disertakan. Kami mengkalkulasi transmitansi dengan sudut datang elektron  $\theta$  dan  $\varphi$ , seperti yang ditunjukkan oleh sistem koordinat elektron pada Gambar 5(b), di mana  $\varphi$  diatur tetap  $\pi/2$  dan hanya memvariasikan  $\theta$ . Dari Gambar 5(a), transmitansi menurun akibat bertambahnya kecepatan fasa elektron di *gate*. Di sisi lain, transmitansi akan maksimal jika sudut datang elektron adalah  $0^\circ$ . Hal tersebut menunjukkan bahwa pada saat sudut datang elektron  $0^\circ$ , elektron akan bergerak lebih mudah.



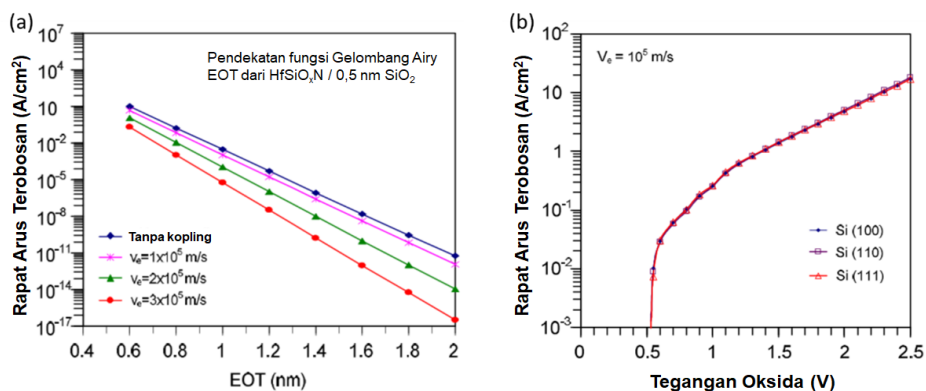
**Gambar 6.** (a) Transmitansi dan (b) densitas arus terobosan elektron pada kapasitor MOS yang dikalkulasi tanpa dan dengan mempertimbangkan efek kopling dari energi kinetik transversal dan longitudinal (Noor dkk., 2010b).

Gambar 6 (a) menunjukkan transmitansi elektron yang bergerak dari *gate* metal dengan kecepatan fasa dalam rentang  $1,5-2,5 \times 10^5$  m/s dan menerobos penghalang yang terdiri dari 2,5 nm  $\text{HfSiO}_x\text{N}$  dan 0,5 nm  $\text{SiO}_2$  pada tegangan oksida 1 V dengan dan tanpa mempertimbangkan efek kopling energi kinetik transversal dan longitudinal. Dari gambar terlihat bahwa transmitansi meningkat seiring dengan meningkatnya energi elektron datang. Saat elektron datang dengan energi lebih tinggi dari tinggi penghalang, transmitansi menunjukkan perilaku osilasi. Selain itu, hasil kalkulasi transmitansi tanpa memasukkan efek kopling menunjukkan hasil yang lebih tinggi dari kalkulasi dengan mempertimbangkan kecepatan fasa elektron di *gate*. Sebagai tambahan, dengan meningkatkan kecepatan elektron di *gate* dapat menurunkan transmitansi. Hal ini disebabkan oleh kecepatan elektron

di *gate* yang dapat membuat potensial penghalang efektif menjadi lebih tinggi dari penghalang.

Dengan menerapkan parameter yang sama dalam perhitungan pada Gambar 6 (a), densitas arus terobosan elektron kemudian dihitung, dengan hasil seperti ditunjukkan pada Gambar 6(b). Dari gambar terlihat bahwa densitas arus terobosan meningkat seiring dengan peningkatan tegangan oksida. Namun, proses terobosan arus dari *gate* metal ke substrat silikon tidak terjadi saat tegangan oksida kurang dari 0,53 V, karena elektron yang berada di tingkat Fermi TiN (*gate*) tidak dapat menempati daerah terlarang pada celah pita substrat p-Si. Densitas arus terobosan yang dihitung tanpa melibatkan efek kopling energi kinetik longitudinal dan transversal menunjukkan nilai tertinggi jika dibandingkan dengan yang dihitung dengan melibatkan efek kopling.

Selain itu, densitas arus terobosan dapat tereduksi dengan memperbesar kecepatan elektron *gate* Hal tersebut dikarenakan tinggi penghalang  $V(z)$  meningkat akibat meningkatnya kecepatan fasa dari elektron *gate*. Selanjutnya, kemiringan pada kurva Gambar 6 (b) terlihat identik yang mengindikasikan bahwa modifikasi potensial penghalang dapat mengkompensasi massa efektif elektron dari potensial penghalang. Model yang dikembangkan dengan menyertakan kecepatan fasa elektron di *gate* dapat digunakan untuk menjelaskan pengamatan eksperimen yang menunjukkan peningkatan kecepatan operasi transistor MOS akibat injeksi elektron berkecepatan tinggi (Mizuno dkk., 2005).



**Gambar 7.** (a) Kerapatan arus terobosan dari kapasitor MOS sebagai fungsi ketebalan oksida ekuivalen dan (b) Kerapatan arus terobosan dari kapasitor MOS pada orientasi substrat yang berbeda (Noor dkk., 2012).

Untuk memverifikasi efek energi kinetik longitudinal dan transversal serta ketebalan oksida ekuivalen (EOT) terhadap arus terobosan, arus terobosan dihitung untuk lapisan antarmuka  $\text{SiO}_2$  dan  $\text{HfSiO}_x\text{N}$  dengan dan tanpa efek kopling yang ditunjukkan pada Gambar 7 (a). Dari hasil perhitungan, terlihat bahwa efek kopling tidak dapat diabaikan dalam perhitungan arus terobosan pada kapasitor MOS untuk lapisan  $\text{HfSiO}_x\text{N}$  yang tebal. Selain itu, ketika ketebalan oksida ekuivalen (EOT) dari  $\text{HfSiO}_x\text{N}$  ditingkatkan, arus terobosan akan tereduksi. Hasil ini mengkonfirmasi bahwa penggunaan  $\text{HfSiO}_x\text{N}$  sebagai oksida *gate* dapat mereduksi arus terobosan.

Kami juga mendemonstrasikan pengaruh orientasi substrat terhadap arus terobosan yang ditampilkan pada Gambar 7 (b). Di sini, kami menggunakan sudut datang elektron  $0^\circ$  dan kecepatan elektron *gate*  $10^5$  m/s. Dari hasil perhitungan dapat dilihat bahwa arus terobosan memiliki karakteristik yang sama pada orientasi substrat Si(100), Si(110), dan Si(111). Artinya arus terobosan dalam kapasitor  $\text{TiN}_x/\text{HfSiO}_x\text{N}/\text{SiO}_2/\text{p-Si}$  tidak dipengaruhi oleh orientasi substrat. Hasil tersebut konsisten dengan studi analisis sebelumnya (Khairurrijal dkk., 2009).

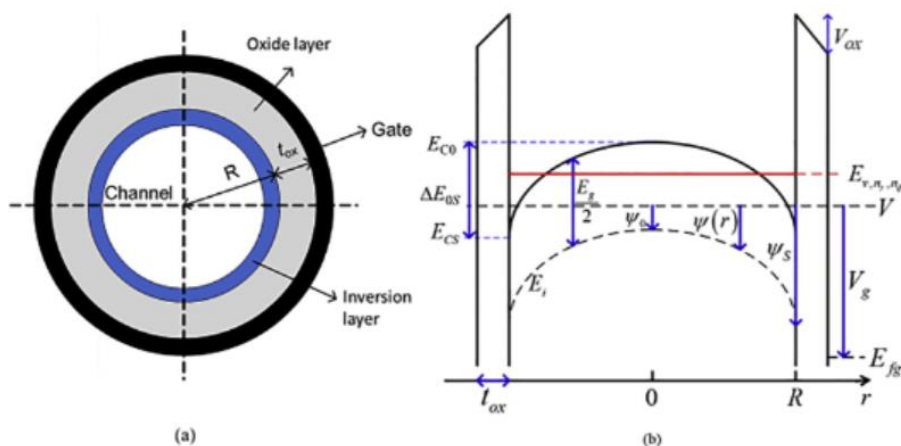
## 2.4 Desain *Cylindrical Surrounding-Gate* (SG) MOSFET

Teknologi penskalaan MOSFET *bulk* telah mendekati batasan fisik, dan sebagai hasilnya *cylindrical surrounding-gate* (SG) MOSFET mendapatkan perhatian riset yang tinggi (Cheng dkk., 2013; Smaani dkk., 2013). SG MOSFET tidak hanya menyediakan kontrol *gate* yang lebih baik untuk meminimisasi efek saluran pendek, tetapi juga memiliki probabilitas arus terobosan *gate* yang rendah ketika dibandingkan dengan *gate* planar yang ketebalan dielektriknya sama. Arus terobosan *gate*, yang merupakan efek negatif yang tidak diinginkan akibat penskalaan terus menerus, adalah pertimbangan penting untuk pengembangan divais. Dalam konteks pengembangan simulasi divais, model analitik sederhana dari SG MOSFET sangat diperlukan.

Dalam kasus SG MOSFET, kami mengembangkan prosedur formulasi analitik untuk arus terobosan *gate*, di mana kami mengaplikasikan metode Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) dengan pendekatan massa efektif (Chaves dkk., 2012). Teknik ini relatif mudah karena integrasi numerik tidak terkandung pada Persamaan akhir. Tidak hanya efek medan listrik, model ini juga mempertimbangkan efek pengurangan kuantum akibat kecilnya

diameter SG MOSFET yang jarang dipertimbangkan oleh beberapa penelitian sebelumnya. Tingkat energi yang diisi oleh elektron merupakan parameter terpenting untuk kalkulasi arus terobosan *gate*. Ketika tingkat energi ditemukan, probabilitas transmisi elektron yang melewati penghalang *gate* oksida dapat dikalkulasi.

Gambar 8 (a) menunjukkan penampang melintang dari SG MOSFET yang ideal. Pada tegangan *gate* yang rendah, elektron hanya terkurung oleh penghalang oksida ketika potensial saluran berbentuk rata. Ketika tegangan *gate* tinggi diaplikasikan, potensial mulai melengkung sehingga pengurungan kuantum struktural dan elektrik akan terjadi seperti ditunjukkan pada Gambar 8 (b).



**Gambar 8.** (a) Skema penampang melintang dan (b) diagram pita energi dari SG MOSFET sepanjang pemotongan tegak lurus saluran (Noor dkk., 2019).

Untuk mendapatkan potensial rata-rata medan yang digunakan dalam kalkulasi tingkat energi, diperlukan ekspresi analitik dari potensial elektrostatik versi kuantum. Untuk itu, langkah pertama adalah menentukan versi kuantum dari potensial permukaan dan sentral. Langkah kedua adalah pendekatan analitik dengan menggunakan formula kuadratik untuk menghubungkan potensial sentral dan permukaan. Kami dapat mendekati potensial permukaan kuantum  $\psi_s^{QM}$  secara analitik sebagai berikut:

$$\psi_s^{QM} = \frac{Q_i^{QM}}{C_{ox}} - V_g + \Delta\phi_i, \quad (7)$$

di mana  $Q_i^{QM}$  adalah densitas muatan kuantum,  $C_{ox} = \epsilon_{ox}/R \ln(1 + t_{ox}/R)$  adalah kapasitansi *gate* oksida,  $\epsilon_{ox}$  adalah permitivitas oksida,  $t_{ox}$  adalah tebal oksida,  $R$  adalah jari jari lapisan silikon,  $V_g$  adalah tegangan *gate*, dan  $\Delta\phi_i$  adalah fungsi kerja *gate*.

Kemudian, potensial sentral kuantum  $\psi_0^{QM}$  dapat dirumuskan sebagai berikut:

$$\psi_0^{QM} = V - \frac{2kT}{q} \ln \left[ \frac{R_c}{2} \sqrt{\frac{q^2 n_i}{2\epsilon_{Si} kT (1 - \alpha^{QM})}} \right]. \quad (8)$$

Di mana  $V$  adalah tingkat quasi-Fermi elektron,  $k$  adalah konstanta Boltzman,  $T$  adalah temperatur,  $q$  adalah muatan elektron,  $R_c = R - z_I$ ,  $z_I$  adalah inversi muatan centroid,  $n_i$  adalah densitas pembawa muatan intrinsik,  $\epsilon_{Si}$  adalah permitivitas elektron, dan  $\alpha^{QM}$  adalah konstanta yang bergantung pada tegangan bias *gate*.

Selanjutnya, bentuk dari potensial elektrostatik 1D sepanjang saluran di-fitting dengan fungsi  $\psi_s^{QM}$  dan  $\psi_0^{QM}$  ke dalam fungsi kuadratik, seperti berikut:

$$\psi(r) = \psi_0^{QM} + (\psi_s^{QM} - \psi_0^{QM}) \frac{r^2}{R^2}. \quad (9)$$

Selanjutnya, pita konduksi yang dapat digunakan sebagai potensial medan rata-rata dalam Persamaan Schrödinger untuk mendapatkan tingkat energi dapat dituliskan sebagai berikut:

$$E_c(r) = \frac{E_g}{2} - q\psi(r). \quad (10)$$

Bentuk analitik dari pita konduksi kuantum tersebut dapat digunakan sebagai potensial medan rata-rata potensial untuk menyelesaikan Persamaan Schrödinger.

Untuk menentukan tingkat energi yang berkaitan dengan potensial medan rata-rata pada Persamaan (10), Persamaan Schrödinger dalam koordinat silinder diberikan oleh persamaan berikut:

$$\frac{\hbar^2}{2m_{r,v}} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \Psi(r, \varphi) + E_c(r) \Psi(r, \varphi) = E_{v,n_r,n_\varphi} \Psi(r, \varphi). \quad (11)$$

Di mana  $\hbar$ ,  $m_{r,v}$ , dan  $\Psi(r, \varphi)$  adalah konstanta Planck, massa efektif sepanjang arah radial, dan solusi fungsi gelombang. Tidak ada solusi analitik sederhana dari Persamaan (11). Oleh sebab itu kami menggunakan pendekatan alternatif

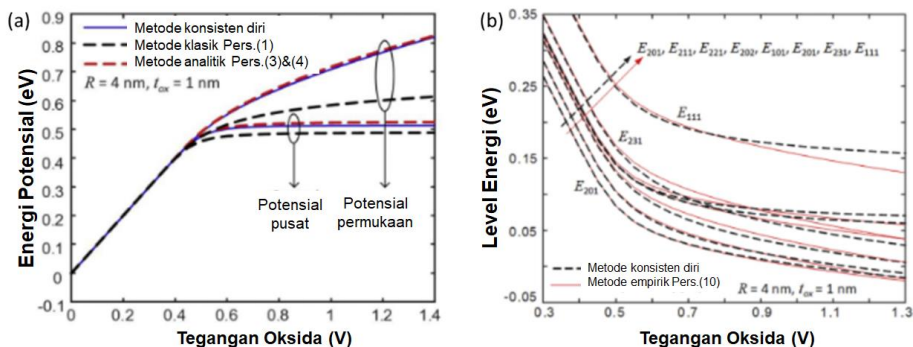
berdasarkan teori perturbasi kuantum, di mana tingkat energi dapat dibagi menjadi dua bagian sebagai berikut:

$$E_{v,n_r,n_\phi} = \frac{\hbar^2 \chi_{v,n_r,n_\phi}^2}{2m_{r,v}R^2} + E_{v,n_r,n_\phi}^1 \quad (12)$$

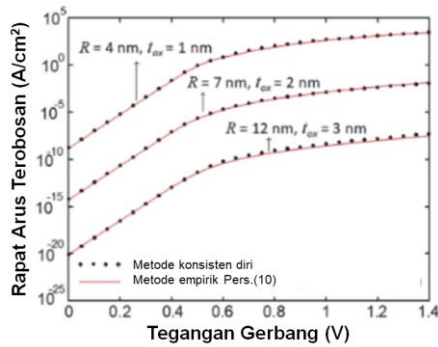
Suku pertama pada ruas kanan adalah tingkat energi non-pertubasi yang diperoleh dengan menyelesaikan Persamaan (11) ketika  $E_c(r) = 0$ . Suku kedua pada ruas kanan berkaitan dengan solusi untuk tingkat energi di bawah kondisi perturbasi. Untuk mengakomodasi hal tersebut, kami menggunakan formulasi empiris sebagai berikut.

$$E_{v,n_r,n_\phi}^1 = E_{c0} - \frac{1}{(1+n_\phi^2)} \left( 1 - \frac{2}{\chi_{v,n_r,n_\phi}^2} \right) (E_{c0} - E_{cs}) \quad (13)$$

Gambar 9 (a) dan (b) membandingkan potensial permukaan dan sentral serta tingkat energi yang dikalkulasi menggunakan perumusan analitik yang dikembangkan dalam penelitian ini dengan yang diperoleh melalui metode *konsisten diri* (*self-consistent method*). Gambar tersebut menunjukkan hasil yang diperoleh dari metode analitik yang kami kembangkan sesuai dengan metode *konsisten diri* (*self-consistent method*). Metode *konsisten diri* (*self-consistent method*) merupakan metode yang cukup sulit dan sangat mengonsumsi waktu sehingga kurang cocok untuk simulasi divais.



**Gambar 9.** (a) potensial permukaan dan sentral, serta (b) tingkat energi dari SG MOSFET dengan *silicon body* beradius 4 nm dan ketebalan oksida 1 nm (Noor dkk., 2019).



**Gambar 10.** Arus terobosan *gate* sebagai fungsi tegangan *gate* dari SG MOSFET dengan berbagai jari-jari dan ketebalan oksida (Noor dkk., 2019).

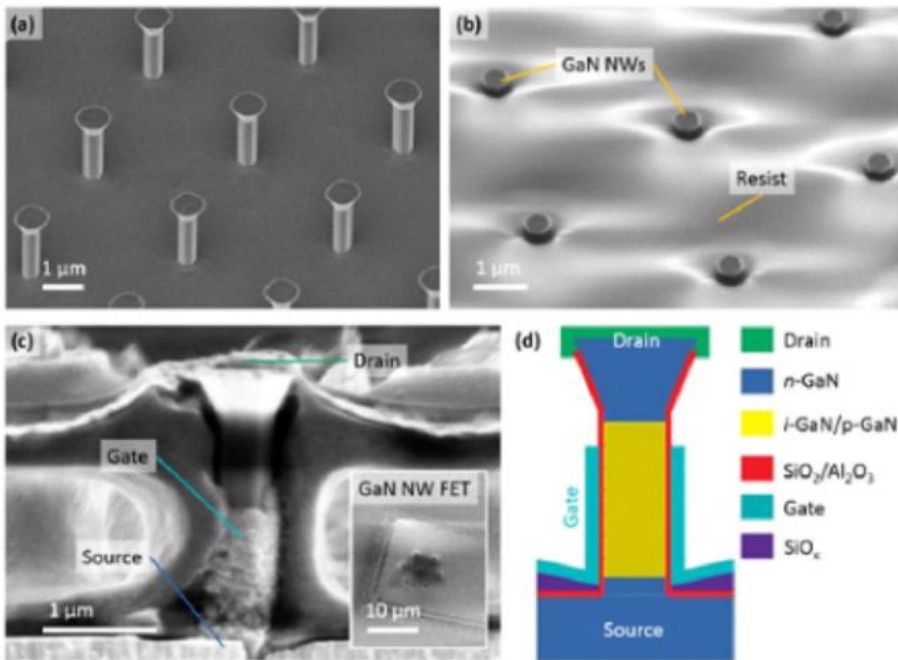
Dikarenakan kami tertarik dalam mengembangkan ekspresi sederhana dari arus terobosan *gate*, kami memilih formulasi analitik pendekatan WKB sebagai berikut:

$$J = \sum_{v,n_r,n_\phi} J_{v,n_r,n_\phi} = \sum_{v,n_r,n_\phi} N_{v,n_r,n_\phi} T_{v,n_r,n_\phi}, \quad (14)$$

di mana  $N_{v,n_r,n_\phi}$  adalah jumlah elektron yang mengisi setiap sub-pita energi, dan  $T_{v,n_r,n_\phi}$  adalah waktu hidup elektron pada keadaan elektronik tertentu. Perumusan lengkap dari  $N_{v,n_r,n_\phi}$  dan  $T_{v,n_r,n_\phi}$  dapat dilihat pada Ref. (Noor dkk., 2019).

Arus terobosan *gate* yang dikalkulasi dengan model ini menunjukkan kesesuaian dengan yang diperoleh melalui simulasi *konsisten diri* (*self-consistent method*) pada daerah tegangan operasi 0-1,4 V, jari-jari silikon 4-12 nm, dan ketebalan oksida *gate* 1-3 nm, seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 10. Arus terobosan menurun ketika ketebalan lapisan oksida meningkat. Hal tersebut dapat terjadi karena medan listrik yang melewati oksida menurun akibat bertambahnya ketebalan oksida. Dengan mereduksi jari-jari  $R$  akan meningkatkan pengurungan kuantum karena jumlah keadaan elektronik meningkat. Di sisi lain, mereduksi  $R$  akan menyebabkan inversi muatan sehingga lebih terdistribusi pada saluran silikon. Hal ini menyebabkan reduksi kedalaman sumur kuantum sehingga arus terobosan menjadi meningkat. Inilah penyebab mengapa semakin kecil  $R$  menyebabkan arus terobosan semakin meningkat. Hasil ini sesuai dengan hasil yang diperoleh pada MOSFET *double-gate* dan *ultra-thin body* (Chang dkk., 2002; Nagaraju dan Dasgupta, 2006). ü

Kami juga melakukan investigasi pada karakteristik arus-tegangan non-linier pada transistor *gallium nitride nanowire* (GaN NW) berarsitektur vertikal dengan mengembangkan formula Landauer-Büttiker (Noor dkk., 2021). Transistor berbasis GaN NW merupakan kandidat perangkat konversi energi masa depan yang menawarkan resistansi rendah, laju on/off yang cepat, frekuensi tinggi, dan efisiensi konversi energi yang tinggi (Reusch dan Strydom, 2015; Zhang dkk., 2016). Dalam pengembangan model, kami membandingkan hasil teoritik dengan data eksperimen dari Yu dkk. (Yu dkk., 2016), dan Fatahillah dkk. (Fatahillah dkk., 2019), untuk memastikan keakuratan. Transistor GaN NW yang dikembangkan oleh dua kelompok riset tersebut memiliki perbedaan pada material dielektriknya, yaitu  $\text{SiO}_2$  dan  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Sketsa dari transistor berbasis GaN NW ditunjukkan pada Gambar 11.



**Gambar 11.** (a) Susunan GaN NW yang difabrikasi dengan fotolitografi dan teknik *hibrid etching*, (b) proses pengisian resis untuk membuat kontak, (c) penampang melintang citra SEM dan (d) sketsa 2-D dari transistor berbasis GaN NW (Noor dkk., 2021).

Dalam membangun model, kami mengasumsikan bahwa GaN NW adalah kawat 1-D dengan dua reservoir pada kedua ujungnya, yaitu *source* dan *drain*. Kemudian, panjang *gate* sama dengan panjang saluran. Arus di dalam kawat



kemudian direpresentasikan dengan formula sederhana berbasis pekerjaan Landauer-Büttiker (Bagwell dan Orlando, 1989; Büttiker dkk., 1985),

$$I_{chan} = G_0 T_e \frac{\Delta\mu}{q}, \quad (15)$$

di mana  $G_0 T_e$  merepresentasikan konduktansi,  $q$  adalah muatan, dan  $\Delta\mu$  adalah perbedaan tingkat fermi.

Dalam kasus GaN-FET<sub>SiO2</sub> dan GaN-FET<sub>Al2O3</sub>, terdapat beberapa hal yang perlu dipertimbangkan ketika menggunakan formula Landauer-Büttiker. Pertama, kemiringan kurva arus *drain* dan tegangan *drain-source* ( $I_d - V_{ds}$ ) bervariasi dan bergantung pada tegangan *gate-source* ( $V_{gs}$ ), yang mengindikasikan bahwa  $G_0$  tidak konstan. Hal ini berarti bahwa model GaN NW untuk GaN-FET<sub>SiO2</sub> dan GaN-FET<sub>Al2O3</sub> tidak dapat dipandang sebagai kasus 1-D murni. Kemudian, kami melakukan investigasi dan menemukan bahwa  $G_0$  mengikuti pola rapat keadaan elektronik (DOS) untuk kasus material 3-D. Oleh sebab itu,  $G_0$  untuk GaN-FET<sub>SiO2</sub> dapat dimodelkan dengan,

$$G_0 = \xi \sqrt{q(V_{gs} - V_{th})}. \quad (16)$$

Di mana  $\xi$  adalah parameter fitting untuk GaN-FET<sub>SiO2</sub>. Namun, untuk GaN-FET<sub>Al2O3</sub> yang mempunyai panjang *gate* yang lebih pendek,  $G_0$  mengikuti formulasi sebagai berikut:

$$G_0 = \zeta (q(V_{gs} - V_{th}))^2, \quad (17)$$

di mana  $\zeta$  adalah parameter fitting untuk GaN-FET<sub>Al2O3</sub>.  $V_{gs}$  berkaitan dengan tegangan *gate-source*, dan  $V_{th}$  merupakan tegangan ambang.

Pertimbangan kedua dalam penggunaan formula Landauer-Büttiker adalah tidak *overlap*-nya struktur *gate* yang menghasilkan sambungan *drain-channel-source*. Kami berargumen bahwa struktur ini akan menghasilkan efek yang mirip dengan efek dioda, di mana sambungan membuat potensial *built-in*. Sebagai konsekuensi,  $\Delta\mu$  kemudian diformulasikan sebagai berikut:

$$\Delta\mu = q(V_{ds} - V_{bi}). \quad (18)$$

Di mana  $V_{ds}$  adalah tegangan *drain-source*, dan  $V_{bi}$  adalah potensial *built-in* sebagai fungsi tegangan *gate-source*.

Di sisi lain, konsekuensi dari Persamaan (18) juga berpengaruh kepada Persamaan (15), di mana pergeseran *ohmic* dalam karakteristik  $I_d - V_{ds}$

menyebabkan munculnya perilaku arus non-linier. Pada Persamaan (15), arus disebabkan oleh konduktansi dari saluran yang dapat dikonfirmasi dengan  $\partial I_{chan}/\partial V_{ds} = 0$ . Sedangkan dalam MOSFET, arus akan mendekati saturasi saat  $V_{ds}$  menuju tak hingga. Oleh sebab itu, dalam studi ini, arus total dengan perilaku non-linier dirumuskan sebagai berikut:

$$I_d = I_{chan} + I_{sat}, \quad (19)$$

di mana  $I_{sat}$  adalah arus saturasi.

Dalam kasus GaN-FET<sub>SiO2</sub> dan GaN-FET<sub>Al2O3</sub>, karena efek hamburan,  $I_{sat}$  dapat dideskripsikan dengan

$$I_{sat} = \Gamma I_{max}, \quad (20)$$

di mana  $\Gamma$  adalah parameter fitting untuk koefisien transmisi saat perangkat mencapai saturasi akibat efek hamburan. Oleh sebab itu, kondisi *quasi-ballistic* tercapai ketika  $\Gamma < 1$ , dan balistik ketika  $\Gamma = 1$ .  $I_{max}$  adalah arus maksimum yang terjadi saat  $\partial I_d/\partial V_{ds} = 0$ , yang memberikan:

$$V_{dsmax} = V_{bi} + \frac{1}{\lambda\beta q} (1 + W(z)). \quad (21)$$

Di mana  $W(z)$  adalah fungsi Lambert  $W$ ,  $\beta = 1/kT$ ,  $k$  adalah konstanta Boltzman,  $T$  adalah temperatur,  $\lambda = R/L$  adalah parameter yang dipengaruhi oleh karakteristik divais, dan  $V_{dsmax}$  adalah  $V_{ds}$  saat arus mencapai maksimum. Pada umumnya, untuk kasus *quasi-ballistic*,  $I_{max}$  memiliki nilai sebagai berikut setelah memasukkan dengan  $V_{dsmax}$

$$I_{max} = \frac{1}{1-\Gamma} \frac{G_0}{\lambda\beta q} W(z) \quad (22)$$

Komponen selanjutnya dari Persamaan (21) yang harus ditentukan adalah potensial  $V_{bi}$ . Setelah menginvestigasi data dari GaN-FET<sub>SiO2</sub>,  $V_{bi}$  untuk GaN-FET<sub>SiO2</sub> dapat dimodelkan dengan persamaan berikut:

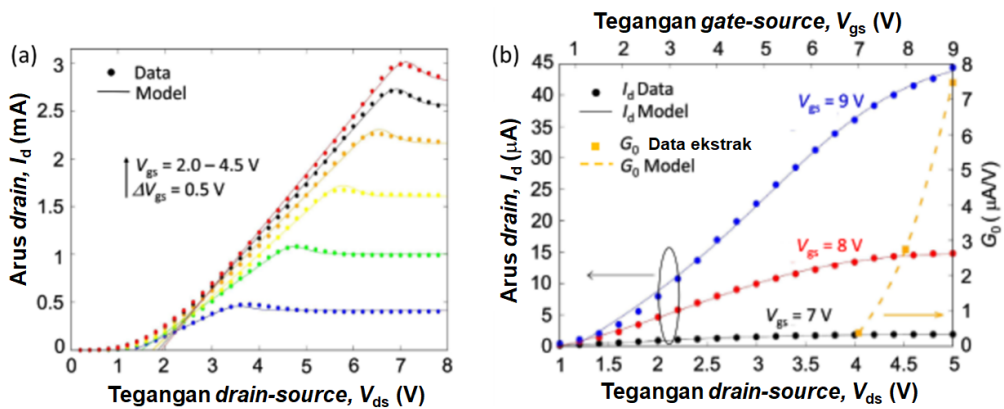
$$V_{bi} = \frac{H}{q\beta} W\left(\frac{ze+1}{2e}\right). \quad (23)$$

$H$  adalah parameter fitting yang merepresentasikan konsentrasi donor di dalam divais. Namun, dalam kasus GaN-FET<sub>Al2O3</sub> di mana  $\lambda \ll 1$ ,  $V_{bi}$  dapat direpresentasikan dengan

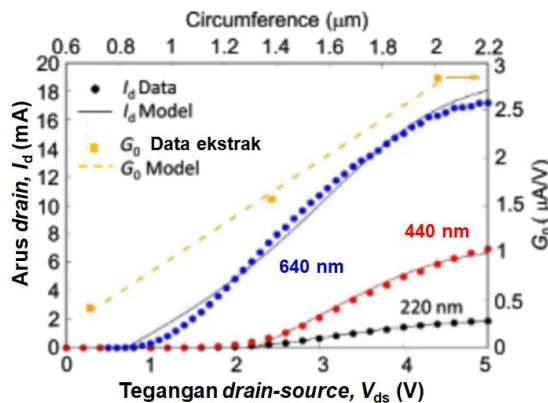
$$V_{bi} \approx \frac{\lambda H}{e} (V_{gs} - V_{th}) + V_{bi0}, \quad (23)$$

di mana  $V_{bi0}$  adalah potensial *built-in* akibat sambungan *pn* dalam GaN-FET<sub>Al2O3</sub>.

Berdasarkan perumusan di atas, model yang telah dikembangkan hanya memerlukan tiga parameter (misalnya:  $\Gamma$ ,  $H$ , dan  $\xi$ ) untuk memfitting data eksperimen dalam rangka memahami fenomena fisis yang terkait. Hasil permodelan menunjukkan bahwa potensial *built-in* bergantung pada tegangan *gate-source* sehingga arus dapat memiliki karakteristik berbeda untuk lapisan material oksida yang berbeda. Gambar 12(a) menunjukkan hasil fitting dari karakteristik  $I_d - V_{ds}$  dari kasus GaN-FET<sub>SiO2</sub>, yang mana arus terkalkulasi cocok dengan hasil pengukuran. Hasil ini mengkonfirmasi bahwa  $I_d$  ditentukan oleh  $G_0$ ,  $V_{bi}$ , dan  $I_{sat}$ , seperti yang dimodelkan oleh Persamaan (19) dan juga menunjukkan bahwa arus tidak dipengaruhi oleh mobilitas elektron.



Gambar 12. Karakteristik  $I_d - V_{ds}$  dari divais (a) GaN-FET<sub>SiO2</sub>, dan (b) GaN-FET<sub>Al2O3</sub> (Noor dkk., 2021).



**Gambar 13.** Hasil fitting dari  $I_d$  dan  $G_0$  dengan variasi diameter untuk data eksperimen GaN-FET<sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub> (Noor dkk., 2021).

Kami juga mempelajari karakteristik GaN-FET<sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub> dengan menggunakan permodelan di atas. Hasil fitting karakteristik  $I_d - V_{ds}$  dari kasus GaN-FET<sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub> ditunjukkan oleh Gambar 12(b). Hasil perhitungan menunjukkan tidak terdapat arus maksimum pada transistor GaN-FET<sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub>. Hal tersebut berarti bahwa  $\Gamma = 1$  (kasus *ballistic*) dan jalur bebas rata-rata menjadi relatif besar dibanding panjang saluran. Hal ini dikarenakan GaN-FET<sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub> memiliki panjang *gate* 0,256 kali lebih pendek dari GaN-FET<sub>SiO<sub>2</sub></sub>, yang mereduksi energi potensial penghalang elektron dalam saluran dan menyebabkan terjadinya mekanisme hamburan. Dari analisis devais yang telah dilakukan, dengan memperpendek panjang *gate* GaN NW MOSFET maka dapat meningkatkan jalur bebas rata-rata sehingga koefisien transmisi meningkat.

## 3 SIMULASI MATERIAL ELEKTRONIK PADA PENUMBUHAN GRAFENA

### 3.1 Urgensi Simulasi Penumbuhan Grafena

Salah satu sumber energi terbarukan yang memiliki potensi besar untuk dimanfaatkan di Indonesia adalah energi surya. Hal tersebut tidak lepas dari letak geografis Indonesia yang berada di sekitar garis khatulistiwa sehingga akan memperoleh cahaya matahari yang optimal setiap tahunnya. Dalam posisi sinar matahari yang tegak lurus dengan permukaan sel surya, satu meter persegi modul sel surya mampu menghasilkan 900-1000 watt. Saat ini, pengembangan teknologi sel surya masih memiliki permasalahan, yaitu bagaimana untuk terus meningkatkan efisiensi sel dan mereduksi biaya fabrikasi yang masih tinggi. Oleh sebab itu, riset terkait teknologi sel surya terutama dari segi materialnya akan terus berkembang dan menjadi topik yang sangat menarik.

Di sisi lain, grafena (*graphene*) merupakan material dua dimensi yang tersusun dari atom karbon yang saling berikatan membentuk hibridisasi  $sp^2$  dan kisi hexagonal. Dikarenakan keunikan strukturnya, grafena memiliki kombinasi sifat yang sangat menarik, yaitu transparan, konduktif, dan fleksibel. Dengan adanya kombinasi sifat tersebut, grafena memiliki potensi yang sangat besar untuk diaplikasikan sebagai elektroda konduktif transparan (*transparent conducting electrode*, TCE). TCE memiliki peran yang sangat penting pada teknologi sel surya, yaitu untuk meningkatkan transmitansi cahaya dan sebagai media transport pembawa muatan. Saat ini, terdapat beberapa studi yang telah memanfaatkan grafena sebagai TCE pada berbagai jenis sel surya misalnya sel surya berbasis silikon (Altuntepe dkk., 2020; Lancellotti dkk., 2020; Shin dkk., 2018), sel surya berbasis organik (Kang dkk., 2021; Ricciardulli dkk., 2018), ataupun sel surya berbasis perovskite (Heo dkk., 2017). Berdasarkan studi tersebut, TCE berbasis grafena memiliki performa yang optimum saat strukturnya adalah grafena beberapa lapis (*few-layer graphene*, FLG).

Untuk merealisasikan pemanfaatan grafena sebagai TCE tentunya diperlukan FLG dalam skala besar, kualitas yang baik, dan jumlah lapisan yang dapat dikontrol. Sampai saat ini telah banyak metode yang dikembangkan untuk memproduksi FLG dalam skala besar, namun hanya

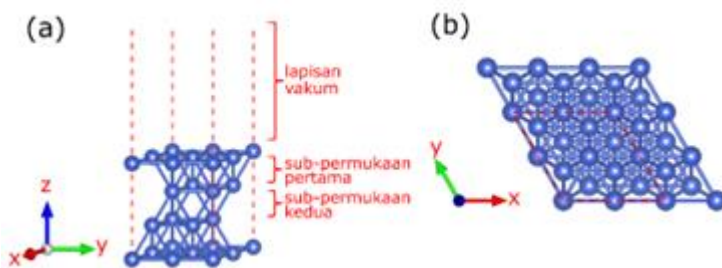
metode deposisi uap kimia (*chemical vapour deposition*, CVD) yang berpotensi untuk menghasilkan FLG dengan sifat yang terkontrol dan kualitas yang baik. Menumbuhkan FLG dengan jumlah lapisan terkontrol sulit dilakukan dengan menggunakan katalis konvensional. Segregasi tak beraturan dari atom C sering dijumpai pada katalis dengan kelarutan atom C yang tinggi seperti Ni, sehingga akan menghasilkan grafena banyak lapis (*multi-layer graphene*, MLG) yang terdiri atas berbagai macam jumlah lapisan. Di sisi lain, efek membatasi diri (*self-limiting*) pada katalis dengan kelarutan atom C yang rendah, seperti Cu, dapat menghalangi penumbuhan grafena lapisan tambahan (*add-layer graphene*, ALG).

Baru-baru ini, pemaduan katalis Cu dengan logam transisi yang memiliki kelarutan atom C yang tinggi menunjukkan potensinya untuk menumbuhkan FLG dengan jumlah lapisan terkontrol. Nikel merupakan logam transisi yang diketahui dapat dipadukan dengan baik dengan katalis Cu. Katalis Cu–Ni menunjukkan kestabilan yang baik karena merupakan sistem biner amorf (*binary amorphous system*). Liu dkk., telah berhasil menumbuhkan grafena satu lapis (*single-layer graphene*, SLG) lebih dari 95% coverage dan grafena dua lapis (*bi-layer graphene*, BLG) lebih dari 91% coverage hanya dengan merubah fraksi atom Ni dari 5,5 at.% menjadi 10,4 at.% (Liu dkk., 2011). Selanjutnya, Huang dkk berhasil menumbuhkan grafena tiga lapis (*tri-layer graphene*, TLG) dengan coverage ~60% pada katalis Cu–Ni dengan fraksi atom Ni sebesar 20.3 at.% (Huang dkk., 2020). Hasil ini memunculkan pertanyaan tentang peran atom Ni didalam katalis paduan Cu–Ni yang secara signifikan merubah sifat pembatasan diri dari katalis Cu murni dan berperan menjadi agen dalam mengontrol jumlah lapisan grafena yang dihasilkan dalam penumbuhan CVD. Meskipun terdapat beberapa studi yang telah berkontribusi dalam memahami mekanisme penumbuhan grafena pada katalis Cu–Ni, studi-studi tersebut belum memberikan penjelasan secara detail dari mekanisme penumbuhan FLG pada katalis Cu–Ni.

Salah satu permasalahan yang perlu dikaji lebih mendalam adalah pengaruh konsentrasi atom Ni di dalam katalis paduan Cu–Ni terhadap mekanisme penumbuhan grafena, di mana mekanisme penumbuhan ini mengendalikan struktur grafena yang dihasilkan. Di sisi lain, pencarian kandidat logam transisi baru untuk mendesain katalis paduan berbasis Cu untuk mengontrol jumlah lapisan grafena perlu dilakukan. Co merupakan salah satu logam transisi yang dipertimbangkan sebagai kandidat untuk

menumbuhkan FLG pada penumbuhan CVD karena temperatur aktivasinya yang relatif rendah dan baik untuk deposisi skala besar. Dikarenakan kelarutan atom C yang relatif tinggi, atom C cenderung berdifusi ke sub-permukaan katalis dan mekanisme penumbuhan segregasi akan berlangsung.. Desain katalis paduan Cu-Co mungkin menjadi pilihan yang tepat untuk merealisasikan kontrol jumlah lapisan grafena pada penumbuhan CVD. Oleh sebab itu, dalam studi ini kami juga ingin mempelajari mekanisme penumbuhan grafena pada katalis paduan Cu-Co.

Dalam studi ini, terdapat dua jenis katalis yang akan ditinjau, yaitu katalis Cu murni sebagai model untuk validasi parameter simulasi dan katalis paduan berbasis Cu. Sistem Cu(111) dipilih sebagai model dasar untuk katalis paduan. Katalis Cu(111) dimodelkan dengan empat lapis super sel (2×2) seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 14(a). Model katalis Cu(111) memiliki lapisan vakum setinggi 15 Å sepanjang arah sumbu-z seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 14 (b). Selanjutnya, spesies sumber karbon: radikal  $CH_n$  ( $n=1, 2, 3$ ) dan monomer C diletakkan pada sistem katalis untuk optimasi lebih lanjut.



**Gambar 14.** Struktur kristal model katalis Cu(111) (a) tampak samping dan (b) tampak atas (Yutomo dkk., 2022).

Analisis energetika, termodinamika, dan kinetika dari adsorpsi spesies sumber karbon di atas katalis dievaluasi dengan metode DFT yang telah terimplementasikan pada kode Quantum Espresso ( Giannozzi dkk., 2017; Giannozzi dkk., 2009). Interaksi elektron valensi dengan inti ion diatur dengan metode *projected augmented wave* (PAW). Fungsional *generalized gradient approximation* (GGA) berbasis Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) digunakan untuk mendekati interaksi pertukaran-korelasi. Posisi atom di katalis dan spesies sumber karbon dioptimasi dengan syarat batas energi sebesar  $\sim 13.6$  meV dan syarat batas gaya  $\sim 25$  meV/Å. Interaksi lemah van der Waals juga dipertimbangkan dengan mengimplementasikan pendekatan semi-empiris

DFT-D2. Kemudian, metode *climbing image-nudged elastic band* (CI-NEB) digunakan untuk mengevaluasi kinetika difusi monomer C.

### 3.2 Pengaruh Jenis Atom M (M=Co, Ni) Terhadap Mekanisme Penumbuhan Grafena pada Katalis Paduan Cu-M(111)

Pemaduan atom M dilakukan dengan mengganti satu atom Cu dengan satu atom M pada tiga lapisan teratas sistem katalis Cu(111). Pertimbangan ini diambil dari analisis energi formasi doping pada kemungkinan konfigurasi atom M. Sistem paduan dengan atom M (M=Co, Ni) yang berada pada lapisan berbeda memiliki kestabilan paling tinggi yang diindikasikan dari rendahnya  $E_f$  (Yutomo dkk., 2022). Substitusi tiga atom M akan menghasilkan konsentrasi paduan sebesar 18,75%. Untuk yang pertama, evaluasi energetik dimulai dengan melihat interaksi spesies sumber karbon di permukaan katalis Cu-M. Interaksi ini dapat direpresentasikan dengan energi adsorpsi ( $E_{ads}$ ) yang dapat dikalkulasi dengan Persamaan dibawah ini:

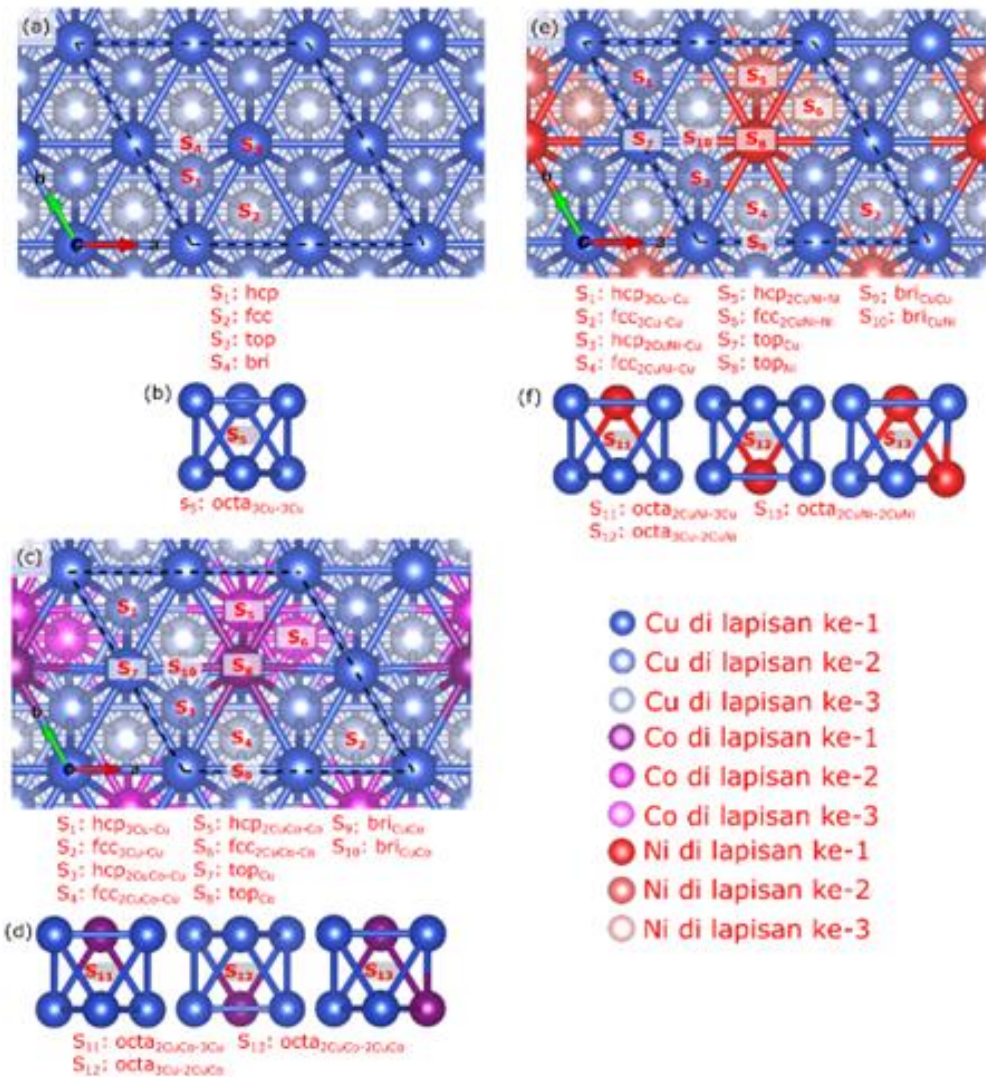
$$E_{ads} = E_{total} - E_{surface} - E_{CH_i}, \quad (24)$$

di mana  $E_{total}$  merepresentasikan energi keadaan dasar spesies sumber karbon teradsorpsi pada katalis,  $E_{surface}$  merujuk kepada energi keadaan dasar untuk katalis, dan  $E_{CH_i}$  merupakan energi keadaan dasar spesies sumber karbon  $CH_i$  ( $i = 0, 1, 2, 3$ ) terisolasi. Semua kemungkinan *site* adsorpsi spesies sumber karbon di permukaan katalis Cu murni dan paduan Cu-M ditunjukkan oleh Gambar 15. Model katalis Cu memiliki empat kemungkinan *site* adsorpsi di permukaan, seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 15(a). Permukaan katalis Cu-M memiliki 10 *site* adsorpsi, seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 15(c) untuk katalis Cu-Co dan Gambar 15(e) untuk katalis Cu-Ni. Spesies monomer C yang teradsorpsi di permukaan katalis diberi label  $C_{surf}$ .

Hasil kalkulasi energi adsorpsi dan jarak setimbang dari spesies sumber karbon di permukaan katalis Cu dibandingkan dengan beberapa studi terdahulu untuk mengecek keakuratan parameter kalkulasi yang digunakan, seperti yang ditunjukkan oleh Tabel 1. Kami mendapatkan hasil yang sesuai dengan studi komputasi terdahulu dengan perbedaan hanya sekamir 1%-2%. Nilai energi adsorpsi dari hampir semua spesies sumber karbon di atas katalis Cu murni adalah di bawah -1 eV, yang mengindikasikan jika spesies sumber karbon mengalami interaksi adsorpsi kimia (*chemisorption*). Namun, energi



adsorpsi minimum spesies  $\text{CH}_4$  masih cukup tinggi yaitu  $-0,190$  eV. Ini mengindikasikan interaksi  $\text{CH}_4$  dengan katalis dikategorikan sebagai adsorpsi fisika (*physisorption*). Oleh sebab itu,  $\text{CH}_4$  tidak dipertimbangkan sebagai kandidat spesies sumber karbon dalam studi ini. Selanjutnya, energi adsorpsi pada *site* fcc merupakan global minimum, yang artinya spesies sumber karbon akan cenderung menempati *site* tersebut saat teradsorpsi di atas katalis Cu(111) (Yutomo dkk., 2022).



**Gambar 15.** Kemungkinan *site* adsorpsi spesies sumber karbon di (a,c,e) permukaan dan (b,d,f) sub-permukaan katalis (a,b) Cu, (c,d) Cu–Co, dan (e,f) Cu–Ni (Yutomo dkk., 2023).

**Tabel 1.** Energi adsorpsi ( $E_{ads}$ ) dan jarak setimbang ( $Z_A$ ) spesies sumber karbon di permukaan dan sub-permukaan katalis Cu (Yutomo dkk., 2022).

Spesies sumber karbon	Site	Studi ini		Studi lain	
		$E_{ads}$ (eV)	$Z_A$ (Å)	$E_{ads}$ (eV)	$Z_A$ (Å)
Permukaan					
CH <sub>4</sub>	hcp	-0,190	2,715		
	fcc	-0,190	2,729		
	top	-0,163	2,416	-0,169 <sup>(a)</sup> , -0,160 <sup>(c)</sup>	
	bri	-0,177	2,656		
CH <sub>3</sub>	hcp	-2,667	2,203	-2,710 <sup>(a)</sup> , -1,850 <sup>(c)</sup>	2,206 <sup>(c)</sup>
	fcc	-2,653	2,195	-2,528 <sup>(a)</sup> , -1,850 <sup>(c)</sup>	2,204 <sup>(c)</sup>
	top	-2,504	1,994	-2,571 <sup>(a)</sup>	1,990 <sup>(c)</sup>
	bri	-2,572	2,120		
CH <sub>2</sub>	hcp	-4,095	1,989	-4,071 <sup>(a)</sup> , -3,550 <sup>(c)</sup>	1,971 <sup>(c)</sup>
	fcc	-4,136	1,987	-4,110 <sup>(a)</sup> , -3,570 <sup>(c)</sup>	1,971 <sup>(c)</sup>
	top	-3,252	1,835	-3,294 <sup>(a)</sup>	
	bri				
CH	hcp	-5,633	1,904	-5,592 <sup>(a)</sup> , -5,340 <sup>(c)</sup>	1,910 <sup>(c)</sup>
	fcc	-5,701	1,904	-5,662 <sup>(a)</sup> , -5,400 <sup>(c)</sup>	1,908 <sup>(c)</sup>
	top	-3,878	1,733		
	bri				
C <sub>surf</sub>	hcp	-6,204	1,832	-6,178 <sup>(b)</sup>	1,845 <sup>(b)</sup>
	fcc	-6,245	1,838	-6,238 <sup>(b)</sup>	1,847 <sup>(b)</sup> , 1,98 <sup>(d)</sup>
	top	-4,272	1,748	-4,281 <sup>(b)</sup>	1,750 <sup>(b)</sup>
	bri	-6,109	1,806	-6,178 <sup>(b)</sup>	1,808 <sup>(b)</sup>
Sub-permukaan					
C <sub>sub-1</sub>	octa	-5,837		-5,390 <sup>(e)</sup>	
C <sub>sub-2</sub>	octa	-5,660			

Energi adsorpsi minimum dan *site* terkait dari adsorpsi spesies sumber karbon pada permukaan katalis paduan Cu–M dirangkum pada Tabel 2. Pemaduan atom M menguatkan interaksi antara spesies sumber karbon dengan permukaan katalis paduan berbasis Cu yang diindikasikan dari tereduksi energi adsorpsi jika dibandingkan dengan katalis Cu murni. Peningkatan interaksi membuat jarak setimbang antara spesies sumber karbon dan permukaan katalis menjadi semakin dekat.. Atom Ni dan Co jelas memiliki peran penting dalam meningkatkan interaksi antara spesies sumber karbon dan permukaan katalis karena selalu menjadi tetangga terdekat *site* global minimum seperti yang ditunjukkan Tabel 2. Fakta ini didukung oleh jarak stabil yang selalu merujuk pada panjang ikatan atom M (M=Co, Ni) dan atom C. Oleh sebab itu, diusulkan bahwa atom M berperan sebagai promotor pengadsorpsi atom (*adsorbing-atom promoter*) pada sistem katalis (Yutomo dkk., 2023).

**Tabel 2.** Energi adsorpsi  $E_{ads}$  minimum dan *site* terkait dari spesies sumber karbon di permukaan dan sub-permukaan katalis Cu–M (M=Co, Ni) dengan konsentrasi M adalah 18,75% (Yutomo dkk., 2023).

Katalis Cu–Co		
Spesies sumber karbon	$E_{ads}$ (eV)	Site
Di permukaan		
CH <sub>3</sub>	-2,898	fcc <sub>2CuCo-Cu</sub>
CH <sub>2</sub>	-5,157	hcp <sub>2CuCo-Cu</sub>
CH	-6,966	fcc <sub>2CuCo-Co</sub>
C <sub>surf</sub>	-8,014	fcc <sub>2CuCo-Co</sub>
Di sub-permukaan		
C <sub>sub-1</sub>	-8,109	Octa <sub>2CuCo-2CuCo</sub>
C <sub>sub-2</sub>	-8,082	Octa <sub>2CuCo-2CuCo</sub>
Katalis Cu–Ni		
Spesies sumber karbon	$E_{ads}$ (eV)	Site
Di permukaan		
CH <sub>3</sub>	-2,708	fcc <sub>2CuNi-Cu</sub>
CH <sub>2</sub>	-4,680	fcc <sub>2CuNi-Cu</sub>
CH	-6,340	fcc <sub>2CuNi-Cu</sub>
C <sub>surf</sub>	-7,157	fcc <sub>2CuNi-Cu</sub>
Di sub-permukaan		
C <sub>sub-1</sub>	-7,415	Octa <sub>2CuCo-2CuCo</sub>
C <sub>sub-2</sub>	-7,225	Octa <sub>2CuCo-2CuCo</sub>

Di dalam penumbuhan FLG, monomer C diharapkan dapat berdifusi ke dalam sub-permukaan katalis. Monomer C yang terdapat di sub-permukaan katalis akan menjadi sumber pembentukan ALG melalui mekanisme segregasi. Oleh sebab itu, adsorpsi monomer C pada sub-permukaan katalis juga dievaluasi dengan menghitung energi adsorpsi menggunakan Persamaan (24). Dalam penelitian ini, hanya dipertimbangkan adsorpsi monomer C pada *site* oktahedral. Terdapat tiga kemungkinan *site* oktahedral pada sub-permukaan katalis Cu–Co dan Cu–Ni, seperti yang ditunjukkan pada Gambar 15(d) dan (f). Kemudian, kami mempertimbangkan adsorpsi karbon monomer hingga subpermukaan yang kedua sehingga monomer C diberi label dengan C<sub>sub-1</sub> dan C<sub>sub-2</sub>.

Energi adsorpsi minimum dan *site* terkait dari adsorpsi monomer C di sub-permukaan katalis dirangkum pada Tabel 1 untuk katalis Cu murni dan Tabel 2 untuk katalis Cu–Co dan Cu–Ni. Energi adsorpsi pada sub-permukaan pertama lebih rendah daripada sub-permukaan kedua. Kondisi seperti ini teramati pada adsorpsi C monomer baik di sub-permukaan katalis Cu murni maupun katalis paduan Cu–M. Kemudian, *site* dengan jumlah atom M sebagai tetangga terdekat yang lebih banyak menjadi *site* global minimum. Fakta ini kembali menunjukkan peran atom M sebagai promotor pengadsorpsi atom seperti yang teramati pada adsorpsi permukaan. Untuk mempelajari

mekanisme penumbuhan grafena, sangat penting membandingkan interaksi monomer C pada permukaan dan sub-permukaan katalis. Dari Tabel 2, monomer C lebih stabil di sub-permukaan daripada permukaan katalis Cu-Co dan Cu-Ni yang diindikasikan dari rendahnya energi adsorpsi. Ini dapat dipahami karena ada lebih banyak atom M (M=Co dan Ni) yang berkontribusi dalam pembentukan ikatan dengan atom C. Oleh sebab itu, transfer elektron dari katalis ke atom C juga lebih signifikan. Kelakuan ini berbeda dengan interaksi monomer C pada katalis Cu murni di mana monomer C lebih stabil pada permukaan daripada sub-permukaan katalis (lihat Tabel 1). Dari hasil ini, kami memprediksi bahwa katalis paduan Cu-M berpotensi digunakan untuk menumbuhkan FLG karena spesies monomer C lebih stabil pada sub-permukaan katalis (Yutomo dkk., 2023).

Pengaruh  $T$  dan  $p_{H_2}$  terhadap kestabilan spesies sumber karbon akan dipertimbangkan dengan mengalkulasi energi bebas Gibbs adsorpsi ( $\Delta G^{ads}$ ) menggunakan persamaan di bawah ini:

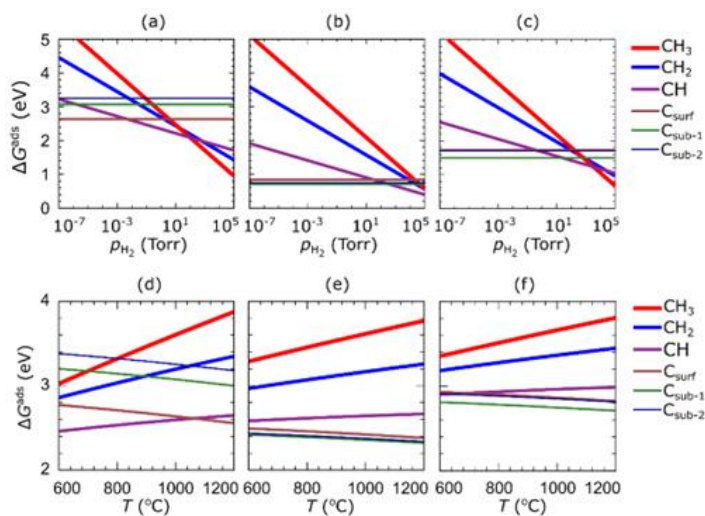
$$\Delta G^{ads} = E_{tot} - E_{surface} + F_{vib} - n_C \mu_C - n_H \mu_H, \quad (25)$$

di mana  $F_{vib}$  merupakan parameter yang mengandung kontribusi vibrasional dari energi bebas Gibbs adsorpsi,  $n_C$  dan  $n_H$  merupakan jumlah atom C dan H pada spesies sumber karbon ( $CH_3$ ,  $CH_2$ ,  $CH$ ,  $C_{surf}$ ,  $C_{sub-1}$ , dan  $C_{sub-2}$ ),  $\mu_C$  dan  $\mu_H$  berturut turut merupakan potensial kimia atom C dan H.

Tekanan parsial hidrogen sangat memengaruhi  $\Delta G^{ads}$  dari spesies sumber karbon pada katalis Cu murni dan katalis paduan Cu-M (M=Co, Ni), seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 16 (a)-(c). Pada katalis Cu-Co, CH merupakan spesies yang paling stabil pada daerah  $p_{H_2} > 10^3$  Torr, kemudian menjadi  $C_{sub-1}$ . Pada katalis Cu-Ni,  $CH_3$  merupakan spesies yang paling stabil pada daerah  $p_{H_2} > 10^3$  Torr, kemudian menjadi CH, dan menjadi  $C_{sub-1}$ . Kondisi ini mengindikasikan jika proses dehidrogenasi akan efektif pada  $p_{H_2}$  yang rendah. Efek  $p_{H_2}$  pada katalis Cu-M berbeda dengan katalis Cu. Pada katalis Cu murni,  $CH_3$  merupakan spesies paling stabil pada daerah  $p_{H_2} > 10^2$  Torr, kemudian menjadi CH, dan  $C_{surf}$ . Namun, fakta ini memperkuat prediksi jika proses dehidrogenasi akan cepat pada  $p_{H_2}$  yang rendah.

Selain  $p_{H_2}$ ,  $T$  juga memengaruhi  $\Delta G^{ads}$  spesies sumber karbon. Gambar 16 (e) menunjukkan  $\Delta G^{ads}$  dari spesies sumber karbon pada katalis paduan Cu-Co sebagai fungsi  $T$ .  $C_{sub-1}$  merupakan spesies yang paling stabil secara

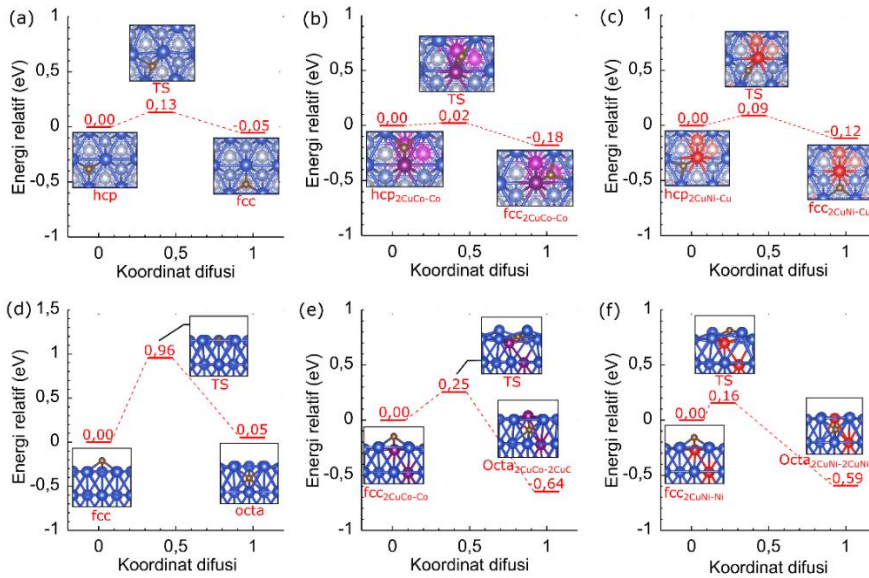
termodinamik karena memiliki  $\Delta G^{ads}$  terendah pada rentang  $T$  yang diberikan. Kestabilan spesies sumber karbon pada katalis Cu–Ni hampir mirip dengan katalis Cu–Co, di mana  $C_{sub-1}$  merupakan spesies yang paling stabil pada rentang  $T$  yang diberikan, seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 16(f). Menariknya, pada kedua katalis paduan,  $C_{surf}$  memiliki kestabilan yang lebih rendah dibanding  $C_{sub-1}$  dan  $C_{sub-2}$  yang mana ini berbeda dengan kelakuan spesies sumber karbon pada katalis Cu murni. Pada katalis Cu murni, CH merupakan spesies yang paling stabil pada  $T < 1060^\circ\text{C}$  dan  $C_{surf}$  merupakan spesies yang paling stabil pada  $T > 1060^\circ\text{C}$ , seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 16 (d).



**Gambar 16.** Energi bebas Gibbs ( $\Delta G^{ads}$ ) adsorpsi sebagai fungsi  $p_{H_2}$  dari spesies sumber karbon pada katalis (a) Cu, (b) Cu–Co, dan (c) Cu–Ni ( $T$  diatur pada  $1000^\circ\text{C}$ ). Energi bebas Gibbs adsorpsi ( $\Delta G^{ads}$ ) sebagai fungsi  $T$  dari spesies sumber karbon pada katalis (d) Cu, (e) Cu–Co, dan (f) Cu–Ni ( $p_{H_2}$  diatur pada  $10^{-2}$  Torr) (Yutomo dkk., 2023).

Hasil di atas menunjukkan bahwa pemaduan atom M ( $M = \text{Co, Ni}$ ) secara signifikan memodifikasi efek  $T$  terhadap kelakuan spesies sumber karbon, yang mana spesies sumber karbon akan lebih mudah terdehidrogenasi daripada di katalis Cu murni. Selanjutnya, karena spesies  $C_{sub-1}$  dan  $C_{sub-2}$  memiliki kestabilan yang tinggi, dapat diusulkan bahwa monomer C yang dihasilkan dari proses dehidrogenasi akan cenderung berdifusi ke dalam katalis paduan Cu–Co dan Cu–Ni. Kondisi ini berbeda dengan yang terjadi pada katalis Cu murni yang mana spesies sumber karbon sederhana hasil dehidrogenasi seperti CH dan  $C_{surf}$  memiliki kestabilan yang tinggi. Kelakuan ini membuat FLG sulit ditumbuhkan pada katalis Cu murni karena ketidak

hadiran monomer C pada sub-permukaan katalis sebagai benih pembentukan ALG. Di sisi lain, kestabilan monomer C di dalam katalis Cu–M (M=Co, Ni) memperkuat prediksi terkait potensi katalis paduan Cu–M untuk menumbuhkan FLG.



**Gambar 17.** Profil energi dari difusi monomer C pada katalis (a,d) Cu, (b,e) Cu–Co, dan (c,f) Cu–Ni (Yutomo dkk., 2023).

Kinetik merupakan aspek yang perlu ditinjau selain energetik dan termodinamik untuk melihat kemungkinan proses kimia yang terjadi dalam penumbuhan grafena. Selanjutnya, kami ingin mengecek kinetika dari kemungkinan jalur difusi monomer C termasuk difusi permukaan dan difusi dari permukaan ke sub-permukaan. Profil energi dari proses difusi karbon monomer pada permukaan katalis ditunjukkan oleh Gambar 17(a)-(c). Pemaduan atom Co atau Ni pada katalis berbasis Cu dapat mereduksi energi aktivasi dan energi produk proses ini. Dari hasil ini, dapat diketahui jika pemaduan atom Co dan Ni membuat atom C lebih mudah berdifusi di atas permukaan katalis. Difusi monomer C dari permukaan menuju ke sub-permukaan katalis juga ditinjau dengan profil energi seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 17(d-f). Energi aktivasi tereduksi secara signifikan akibat pemaduan atom Co dan atom Ni.

Untuk memaknai hasil analisis kinetik, energi aktivasi yang diperoleh dapat dibandingkan dengan energi atom tunggal pada temperatur

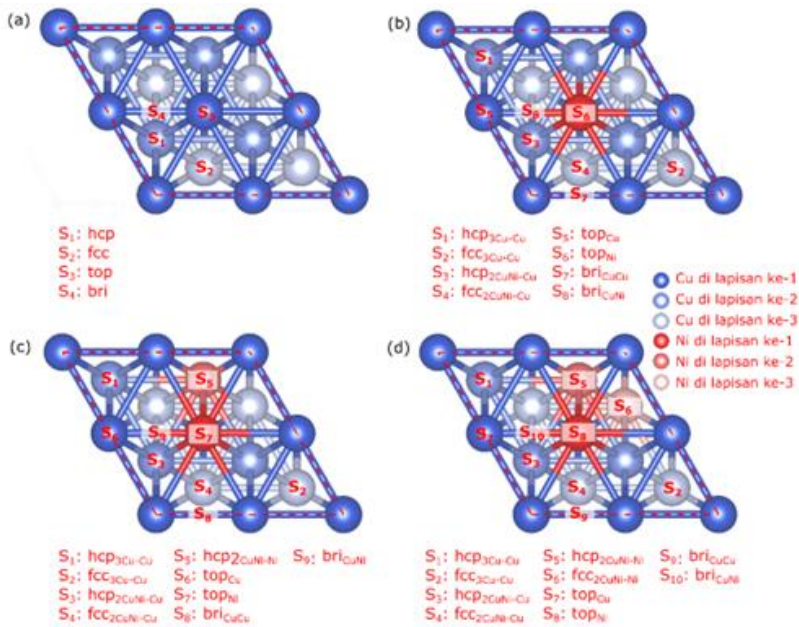
penumbuhan, yaitu  $\sim 1000$  °C (0,17 eV). Ketika hasil ini dibandingkan dengan hasil kalkulasi energi aktivasi proses difusi dari permukaan ke sub-permukaan kalis, energi aktivasi yang lebih rendah hanya diperoleh dengan penggunaan katalis Cu–Ni saja. Oleh sebab itu, proses difusi monomer C dari permukaan menuju sub-permukaan katalis hanya mungkin berlangsung pada katalis Cu–Ni. Melihat hasil ini, spesies aktif sumber karbon dan kemungkinan mekanisme penumbuhan pada tiap-tiap katalis dapat ditentukan, yaitu sebagai berikut: CH dan  $C_{\text{surf}}$  merupakan spesies aktif pada katalis paduan Cu murni sehingga mekanisme penumbuhan berlangsung secara termediasi permukaan,  $C_{\text{surf}}$  merupakan spesies aktif pada katalis paduan Cu–Co sehingga mekanisme penumbuhan juga berlangsung secara termediasi permukaan, dan  $C_{\text{sub-1}}$  merupakan spesies aktif pada katalis paduan Cu–Ni sehingga mekanisme penumbuhan berlangsung secara segregasi. Pemilihan  $C_{\text{surf}}$  sebagai spesies aktif pada katalis paduan Cu–Co berdasarkan energi aktivasi yang relatif tinggi meskipun berdasarkan analisis energetik dan termodinamik spesies monomer C dapat stabil pada sub-permukaan katalis. Mekanisme penumbuhan termediasi permukaan cenderung menghasilkan SLG, sedangkan mekanisme segregasi permukaan cenderung menghasilkan FLG. Oleh sebab itu, hanya katalis Cu–Ni yang berpotensi digunakan untuk menumbuhkan FLG (Yutomo dkk., 2023).

### **3.3 Pengaruh Fraksi Atom Ni Terhadap Mekanisme Penumbuhan Grafena pada Katalis Paduan Cu–Ni (111)**

Berdasarkan subbab sebelumnya, hanya katalis Cu–Ni yang berpotensi digunakan sebagai katalis untuk menumbuhkan FLG karena monomer C pada sub-permukaan merupakan spesies aktif yang akan mengendalikan mekanisme penumbuhan secara segregasi. Untuk studi lebih lanjut, pengaruh fraksi atom Ni terhadap mekanisme penumbuhan grafena pada katalis paduan Cu–Ni akan dipelajari pada bagian ini. Dalam studi ini, tiga variasi fraksi atom Ni dalam katalis paduan Cu–Ni (111) dipertimbangkan, yaitu: 6,25 at.% (Cu–Ni-1), 12,50 at.% (Cu–Ni-2), dan 18,75 at.% (Cu–Ni-3).

Katalis paduan Cu–Ni-1 dimodelkan dengan menyubstitusi satu atom Cu pada lapisan teratas dari sistem Cu (111). Untuk memodelkan katalis Cu–Ni-2, dua atom Cu yang berturut-turut terletak pada lapisan pertama dan kedua sistem Cu (111) disubstitusi dengan dua atom Ni. Sebagai konsekuensi, atom Ni

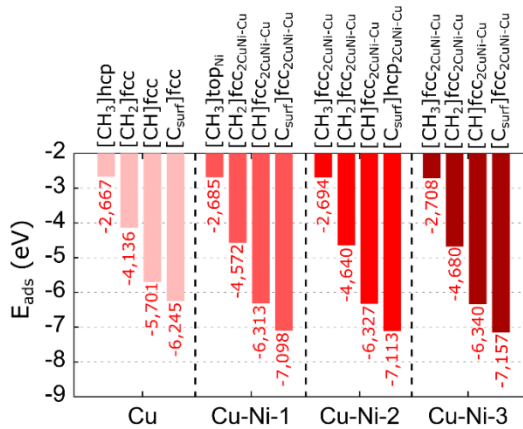
yang ketiga disubstitusikan pada lapisan ketiga sistem Cu (111) untuk memodelkan paduan Cu–Ni-3. Pertama, kestabilan spesies sumber karbon di permukaan katalis Cu–Ni dengan berbagai konsentrasi Ni dievaluasi. Kestabilan spesies sumber karbon direpresentasikan oleh energi adsorpsi  $E_{ads}$  yang dapat dikalkulasi berdasarkan Persamaan 24. Pemaduan atom Ni meningkatkan jumlah kemungkinan *site* adsorpsi. Permukaan dari katalis Cu–Ni-1, Cu–Ni-2, dan Cu–Ni-3 berturut turut memiliki 8, 9, dan 10 *site* adsorpsi, seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 18.



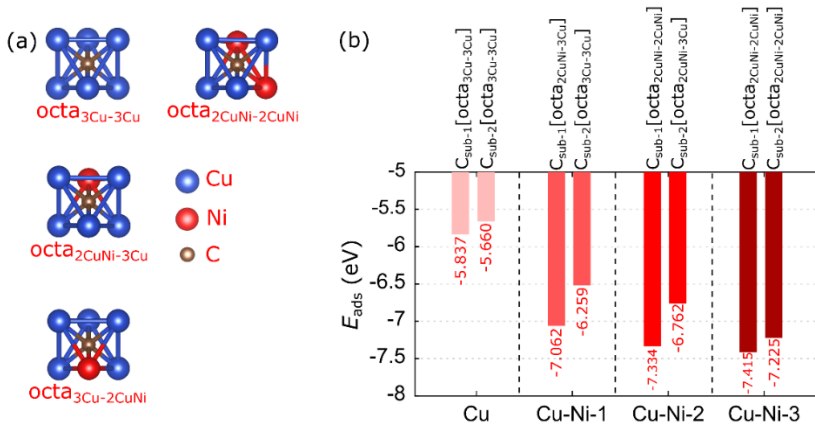
**Gambar 18.** Tampak atas dari kemungkinan *site* adsorpsi di permukaan katalis (a) Cu murni, (b) Cu–Ni-1, (c) Cu–Ni-2, dan (d) Cu–Ni-3 (Yutomo dkk., 2022).

Gambar 19 menunjukkan pemaduan atom Ni pada katalis Cu dapat menurunkan energi adsorpsi. Tambahan, energi adsorpsi menjadi semakin lebih kecil saat fraksi atom Ni pada katalis paduan ditingkatkan. Kondisi ini menunjukkan bahwa mengontrol kekuatan interaksi antara spesies sumber karbon dengan katalis dapat dilakukan dengan mengatur konsentrasi atom Ni di dalam katalis paduan. Energi adsorpsi berbanding lurus dengan jarak stabil spesies sumber karbon dengan katalis. Semakin kecil energi adsorpsi maka akan semakin dekat jarak stabil. Kecenderungan ini sesuai dengan beberapa studi komputasi terdahulu terkait interaksi molekul dengan sistem permukaan (Bahamon dkk., 2021; Hu dkk., 2016).





**Gambar 19.** Energi adsorpsi terendah dari spesies sumber karbon di atas permukaan katalis Cu-Ni (Yutomo dkk., 2022).



**Gambar 20.** (a) *Site* oktahedral (octa) yang mungkin dan (b) energi adsorpsi minimum dari adsorpsi spesies monomer C pada sub-permukaan dari katalis Cu dan Cu-Ni (Yutomo dkk., 2022).

Berdasarkan studi eksperimen, monomer C dapat berdifusi pada sub-permukaan katalis paduan Cu-Ni saat penumbuhan grafena menggunakan metode CVD (Huang dkk., 2018; Wu dkk., 2015). Oleh sebab itu, adsorpsi spesies karbon monomer pada sub-permukaan perlu dipertimbangkan. Adsorpsi spesies monomer C hanya ditinjau hingga sub-permukaan kedua. Gambar 9 (a) menunjukkan visualisasi dari kemungkinan *site* oktahedral dari katalis Cu dan Cu-Ni. Adsorpsi pada *site* tetrahedral tidak stabil dan cenderung bermigrasi ke *site* oktahedra terdekat. Sehingga, kami hanya mempertimbangkan adsorpsi spesies monomer C di *site* oktahedra saja. Energi adsorpsi minimum dan *site* global minimum kemudian dirangkum

pada Gambar 20(b). Hasil ini menunjukkan bahwa kehadiran atom Ni sebagai salah satu atom tetangga terdekat dari *site* oktahedral terkait dapat membuat adsorpsi monomer C menjadi lebih stabil.

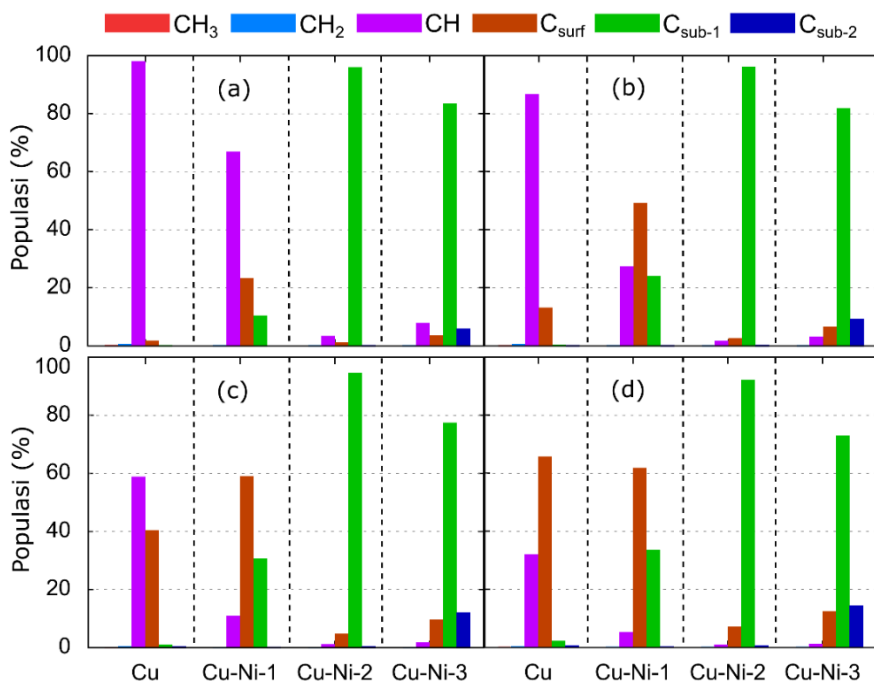
Gambar 20 (b) juga menunjukkan peningkatan fraksi atom Ni pada katalis paduan dapat mereduksi energi adsorpsi. Kondisi ini diprediksi karena bertambahnya jumlah keadaan kosong yang dimiliki oleh orbital Ni 3d yang dapat memfasilitasi ikatan yang kuat antara atom Ni-C. Prediksi ini didukung oleh analisis *charge density difference* yang mengindikasikan bahwa kelebihan muatan terlokalisasi pada ikatan Ni-C daripada Cu-C. Monomer C menerima lebih banyak elektron dan atom Ni lebih banyak mendonorkan elektron, ketika fraksi atom Ni di katalis Cu-Ni ditingkatkan. Oleh sebab itu, ikatan Ni-C menjadi lebih kuat, dan energi adsorpsi menjadi lebih negatif. Analisis penting lainnya adalah membandingkan energi adsorpsi spesies monomer C pada permukaan dan sub-permukaan. Katalis Cu-Ni-1 memiliki kelakuan yang mirip dengan Cu karena fraksi atom Ni masih rendah, namun selisih energi adsorpsi pada permukaan dan sub-permukaan tidak terlalu besar. Selanjutnya, katalis paduan Cu-Ni-2 dan Cu-Ni-3 memiliki kelakuan yang berbeda dari katalis Cu dan Cu-Ni-1, di mana adsorpsi pada sub-permukaan lebih stabil daripada permukaan. Dari hasil ini, terlihat jelas faktor konsentrasi atom Ni di dalam katalis paduan sangat berpengaruh pada kestabilan adsorpsi monomer C.

Kondisi penumbuhan seperti temperatur dan tekanan partial H<sub>2</sub> tentunya memengaruhi kelimpahan spesies sumber karbon di dalam sistem CVD. Spesies sumber karbon yang dominan pada kondisi penumbuhan tertentu dapat dikatakan sebagai spesies aktif yang menentukan mekanisme penumbuhan grafena. Untuk mendapatkan spesies aktif sumber karbon pada masing masing katalis yang dimodelkan, kami menghitung populasi relatif menggunakan Persamaan berikut.

$$P = \frac{\exp\left(\frac{\Delta G^{ads}}{k_B T}\right)}{\sum \exp\left(\frac{\Delta G^{ads}}{k_B T}\right)} \quad (26)$$

Pada umumnya penumbuhan grafena dengan menggunakan metode CVD dilakukan pada rentang temperatur 600-1200 °C. Oleh sebab itu, populasi relatif spesies sumber karbon juga dikalkulasi pada rentang temperatur 600-1200 °C dan tekanan parsial H<sub>2</sub> diatur sebesar 10<sup>-2</sup> Torr, seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 10.

Pada temperatur 600 °C, spesies yang paling mendominasi pada katalis Cu adalah spesies CH dengan populasi sebesar 97,88%, seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 21 (a). Spesies CH<sub>3</sub> dan CH<sub>2</sub> populasinya sangatlah sedikit akibat telah terdehidrogenasi oleh energi termal. Pada katalis Cu-Ni-1, spesies CH juga mendominasi dengan prosentase sebesar 66,69% diikuti oleh spesies C<sub>surf</sub> dan C<sub>sub-1</sub> dengan populasi sebesar 23,08% dan 10,22. Dengan demikian, disosiasi spesies CH menjadi monomer C lebih cepat pada katalis paduan Cu-Ni-1. Kemudian, spesies C<sub>sub-1</sub> mendominasi pada katalis Cu-Ni-2 dan Cu-Ni-3. Lebih-lebih, itu juga terlihat kehadiran spesies C<sub>sub-2</sub> dengan populasi sebesar 5,68% pada katalis Cu-Ni-3. Ini menunjukkan bahwa semakin besar konsentrasi Ni pada katalis paduan Cu-Ni menyebabkan monomer C yang dihasilkan dari proses dehidrogenasi lebih mudah berdifusi ke dalam sub-permukaan.



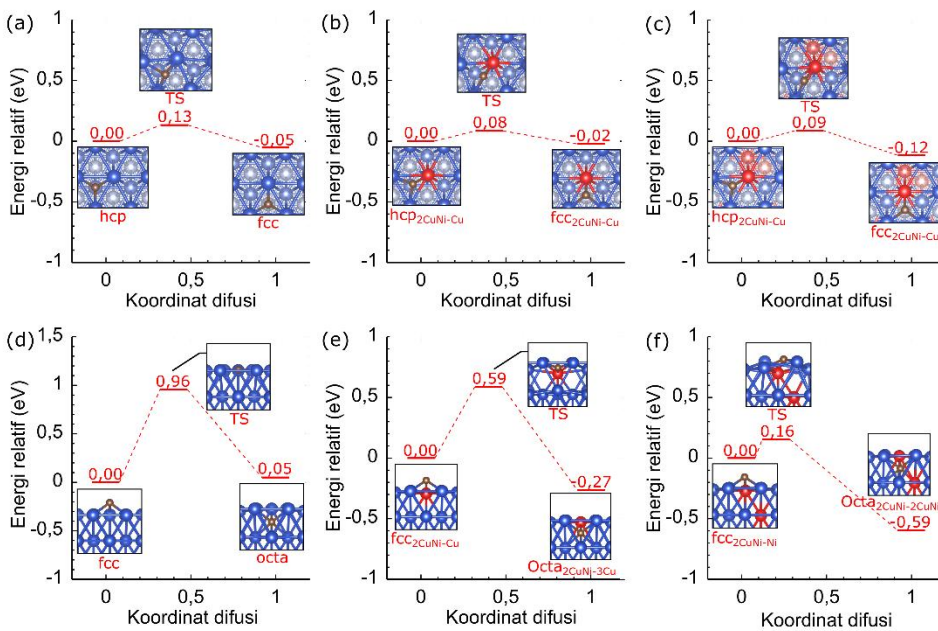
**Gambar 21.** Populasi relatif dari spesies sumber karbon pada katalis Cu, Cu-Ni-1, Cu-Ni-2, dan Cu-Ni-3 pada berbagai variasi temperatur: (a) 600 °C, (b) 800 °C, (c) 1000 °C, dan (d) 1200 °C (Yutomo dkk., 2022).

Pada temperatur 800 °C, populasi spesies C<sub>surf</sub> pada katalis Cu meningkat hingga 12,94%, seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 21(b). Kondisi ini mengindikasikan adanya sebagian spesies CH yang telah terdisosiasi menjadi

$C_{\text{surf}}$ . Pada katalis Cu–Ni-1, spesies  $C_{\text{surf}}$  menjadi yang paling dominan dengan populasi sebesar 48,97% dan spesies  $C_{\text{sub-1}}$  mengalami peningkatan hingga 23,80%. Hasil ini kembali menunjukkan bahwa pemaduan Ni dapat mempercepat laju dehidrogenasi spesies sumber karbon. Selanjutnya, spesies  $C_{\text{sub-1}}$  masih mendominasi pada katalis Cu–Ni-2 dan Cu–Ni-3. Peningkatan temperatur lebih lanjut hingga 1000 °C menyebabkan populasi spesies  $C_{\text{surf}}$  pada katalis Cu terus meningkat hingga 40,22%, namun spesies CH masih mendominasi, seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 21(c). Pada katalis Cu–Ni-1, populasi spesies  $C_{\text{surf}}$  dan  $C_{\text{sub-1}}$  terus meningkat hingga berturut-turut sebesar 58,54% dan 30,46%. Selanjutnya, spesies  $C_{\text{sub-1}}$  tetap mendominasi pada katalis Cu–Ni-2 dan Cu–Ni-3. Pada temperatur 1200 °C, populasi spesies  $C_{\text{surf}}$  di atas katalis Cu meningkat hingga 61,58%, seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 21(d). Oleh sebab itu,  $C_{\text{surf}}$  merupakan spesies dominan pada katalis Cu dan Cu–Ni-1.

Dari analisis di atas, dapat diketahui bahwa CH dan  $C_{\text{surf}}$  merupakan dua spesies yang berkompetisi pada katalis Cu. Oleh sebab itu, CH dan  $C_{\text{surf}}$  merupakan spesies aktif yang berperan dalam menentukan mekanisme penumbuhan grafena. Kelakuan spesies sumber karbon di atas katalis Cu–Ni-1 memiliki kemiripan dengan katalis Cu, yang mana spesies CH dan  $C_{\text{surf}}$  berkompetisi untuk menjadi spesies yang paling dominan. Oleh sebab itu, kami memprediksi hanya CH dan  $C_{\text{surf}}$  yang merupakan spesies aktif pada katalis Cu–Ni-1. Selanjutnya,  $C_{\text{sub-1}}$  merupakan spesies aktif pada katalis Cu–Ni-2 dan Cu–Ni-3 karena selalu dominan pada semua rentang temperatur yang digunakan. Hasil ini mendukung pengamatan eksperimental terdahulu (Wu dkk., 2015) yang mendapatkan bahwa katalis Cu–Ni dengan konsentrasi Ni yang berbeda akan memiliki kelakuan yang berbeda. Berdasarkan studi tersebut, Katalis  $\text{Cu}_{90}\text{-Ni}_{10}$  memiliki kelakuan seperti katalis Cu murni yang mana berlangsung mekanisme penumbuhan secara termediasi permukaan, sedangkan mekanisme penumbuhan pada katalis  $\text{Cu}_{85}\text{-Ni}_{15}$  dan  $\text{Cu}_{80}\text{-Ni}_{20}$  didominasi oleh segregasi monomer C di dalam katalis (Wu dkk., 2015). Dalam studi ini, model katalis Cu–Ni-1, Cu–Ni-2, dan Cu–Ni-3 berturut-turut mereplikasi katalis  $\text{Cu}_{90}\text{-Ni}_{10}$ ,  $\text{Cu}_{85}\text{-Ni}_{15}$ , dan  $\text{Cu}_{80}\text{-Ni}_{20}$ . Perlu diperhatikan bahwa mekanisme penumbuhan sangat memengaruhi struktur grafena yang dihasilkan. Mekanisme penumbuhan termediasi permukaan cenderung menghasilkan SLG sedangkan mekanisme segregasi cenderung menghasilkan FLG (Yutomo dkk., 2022).

Gambar 22 (a)-(c) berturut-turut menunjukkan profil energi dari proses difusi monomer C pada permukaan katalis Cu, Cu-Ni-1, dan Cu-Ni-3. Pemaduan atom Ni tidak berpengaruh signifikan terhadap proses difusi permukaan monomer C, yang mana hanya teramati adanya sedikit penurunan energi aktivasi setelah pemaduan atom Ni. Peningkatan fraksi atom Ni juga tidak begitu memengaruhi profil energi proses difusi permukaan monomer C. Kondisi ini diprediksi karena proses difusi permukaan monomer C hanya dipengaruhi oleh atom Cu atau Ni yang ada di permukaan saja, yang mana, dalam studi ini, katalis Cu-Ni-1 dan Cu-Ni-3 dimodelkan dengan densitas atom Ni di permukaan katalis yang sama. Gambar 22 (d)-(f) berturut-turut menunjukkan profil energi dari proses difusi monomer C dari permukaan menuju sub-permukaan katalis Cu, Cu-Ni-1, dan Cu-Ni-3. Telah teramati bahwa pemaduan Ni menyebabkan penurunan energi produk secara signifikan. Kondisi ini menyebabkan difusi ke sub-permukaan yang awalnya merupakan proses endotermik pada katalis Cu murni menjadi proses eksotermis pada katalis Cu-Ni. Peningkatan fraksi atom Ni terlihat menurunkan energi produk lebih lanjut, yang mana, pada katalis Cu-Ni-3, energi produk menjadi  $-0,59$  eV.



**Gambar 22.** Profil energi dari difusi monomer C pada katalis (a,d) Cu, (b,e) Cu-Ni-1, dan (c,f) Cu-Ni-3 (Yutomo dkk., 2022).

Tambahan, pemaduan atom Ni juga dapat mereduksi energi aktivasi proses difusi monomer C dari permukaan menuju sub-permukaan katalis. Pada katalis Cu-Ni-1, energi aktivasi tereduksi menjadi 0,59 eV. Namun, meskipun energi aktivasi telah tereduksi, energi aktivasi masih cukup tinggi jika dibandingkan dengan energi rata-rata atom tunggal pada temperatur 1300 K, yang hanya 0,17 eV. Dengan begitu, proses difusi monomer C ke sub-permukaan katalis Cu-Ni-1 tidak favorit secara kinetika. Hasil ini mendukung analisis termodinamika yang menunjukkan jika spesies sumber karbon pada katalis Cu-Ni-1 adalah spesies CH dan C<sub>surf</sub>. Melalui analisis kinetika, kembali terlihat jika mekanisme penumbuhan grafena pada katalis paduan Cu-Ni dengan konsentrasi Ni yang rendah akan sama dengan mekanisme penumbuhan pada katalis Cu murni. Peningkatan lebih lanjut fraksi atom Ni dapat mereduksi energi aktivasi, yang mana pada katalis Cu-Ni-3 menjadi 0,16 eV. Seperti yang telah diulas sebelumnya, energi aktivasi ini lebih rendah dari energi atom tunggal pada temperatur penumbuhan. Oleh sebab itu, hanya katalis Cu-Ni-3 (fraksi atom Ni adalah ~18,75%) yang dapat memfasilitasi proses difusi atom C ke dalam sub-permukaan katalis. Hasil ini kembali menunjukkan jika katalis Cu-Ni dengan fraksi atom Ni lebih dari 18,75% berpotensi digunakan untuk menumbuhkan FLG dengan jumlah lapisan terkontrol secara presisi.

## 4 PENUTUP DAN RISET LANJUTAN

Penelitian dalam bidang komputasi divais material *nanowire* (NW) transistor menawarkan sejumlah prospek menarik yang dapat dieksplorasi. Transistor NW merupakan salah satu jenis transistor yang menggunakan material berukuran nanometer. Studi lebih lanjut untuk meningkatkan efisiensi dan kinerja transistor NW masih menyediakan prospek riset lanjutan yang besar. Ini melibatkan peningkatan desain struktur, pemilihan material, dan pengoptimalan parameter operasional. Kajian lebih lanjut tentang efek kuantum dalam transistor NW dan cara mengimplementasikannya dalam perumusan analitik perlu dikembangkan lebih lanjut.

Pada aspek simulasi mekanisme penumbuhan grafena, masih terdapat beberapa pertanyaan terbuka yang menarik untuk riset lanjutan meskipun gambaran keseluruhan mekanisme penumbuhan grafena pada katalis konvensional telah tersedia. Misalnya, secara eksperimen, orientasi antarmuka antara substrat dengan grafena yang tumbuh di atasnya diprediksi sebagai hasil interaksi antara tepi grafena dengan substrat. Prediksi eksperimen ini tentunya perlu dipelajari secara komputasi untuk memastikannya, apalagi jika mempertimbangkan pengaruh tekanan parsial hidrogen yang tinggi.

Baru-baru ini, terdapat beberapa teknologi maju yang digunakan dalam eksperimen untuk mempercepat proses penumbuhan grafena, misalnya penggunaan molekul oksigen dan fluorine. Mekanisme baru diharapkan dapat diperoleh ketika meninjau proses tersebut dengan menggunakan studi komputasi material. Pada saat bersamaan, sangat menarik jika kami dapat menyediakan jawaban terkait mengapa beberapa protokol sederhana seperti penggunaan spesies sumber karbon yang lebih kompleks (ethylene dan acetylene) tidak dapat menghasilkan grafena dengan kualitas tinggi. Kemudian menariknya, dengan menggunakan prosedur komputasi material yang sama, kami dapat mempelajari mekanisme penumbuhan material dua dimensi yang lain seperti boron nitrida dan transition metal dichalcogenides. Tentunya, bidang ini merupakan bidang yang menarik untuk dieksplor di masa yang akan datang.





# UCAPAN TERIMA KASIH

Segala puja dan puji, serta syukur penulis panjatkan ke hadirat Allah Swt., atas segala nikmat, karunia, dan rahmat-Nya yang telah diberikan sehingga penulis memperoleh amanah sebagai Guru Besar di Institut Teknologi Bandung (ITB) dalam Bidang Simulasi Material dan Divais Elektronik dengan proses yang lancar dan relatif cepat.

Ucapan terima kasih dan penghargaan yang sebesar-besarnya penulis sampaikan kepada pimpinan ITB, pimpinan dan anggota Forum Guru Besar dan Senat Akademik, serta seluruh Sivitas Akademik ITB atas kesempatan dan dukungan yang diberikan kepada penulis untuk mengabdikan diri di institusi yang penulis cintai.

Ucapan terima kasih dan penghargaan penulis sampaikan pula kepada Dekanat, Senat, kolega dosen, dan tenaga kependidikan FMIPA ITB yang telah mendukung dan banyak membantu mulai dari tahap persiapan, proses pengajuan, sampai terbitnya SK Guru Besar. Ucapan terima kasih dan penghargaan juga disampaikan kepada rekan sejawat dosen dan tenaga kependidikan di Prodi Fisika serta KK Fisika dan Teknologi Material Maju atas kekeluargaan dan kerja samanya sehingga terbentuk atmosfer suasana kerja yang baik dan menyenangkan.

Ucapan terima kasih dan penghargaan yang setinggi-tingginya penulis sampaikan kepada para guru sejak jenjang SD sampai perguruan tinggi, serta pembimbing selama studi sarjana hingga doktor, yaitu Prof. Khairurrijal, Prof. Sukirno (Alm.), Prof. Mikrajuddin Abdullah, dan Prof. Yudi Darma, atas segala bimbingan dan motivasi yang diberikan dalam perjalanan studi dan karir penulis.

Ucapan terima kasih penulis sampaikan kepada Prof. Khairurrijal (FMIPA ITB), Prof. Zaki Su'ud (FMIPA ITB), Prof. Irawati (FMIPA ITB), Prof. Brian Yulianto (FTI ITB), Prof. Kuwat Triyana (FMIPA UGM), Prof. Huda Abdullah (Universiti Kebangsaan Malaysia), Prof. Agus Hasan (Norwegian University of Science and Technology) dan Prof. David Marpaung (University of Twente) yang telah memberikan rekomendasi untuk usulan guru besar penulis.

Tidak lupa penulis ucapkan terima kasih kepada rekan-rekan dosen peneliti dan mahasiswa yang turut andil membantu dalam penelitian dan penyusunan buku ini, yaitu Prof. Khairurrijal, Prof. Toto Winata, Dr. Erik Bhekti Yutomo, Dr. Ibnu Syuhada, Dr. Fitri Aulia Permatasari, Christoforus Bimo, M.Si., Fandi Oktasendra, M.Sc., dan rekan-rekan lainnya yang tidak bisa disebutkan satu per satu.

Penulis ucapkan terima kasih dan penghargaan secara khusus kepada kedua orang tua dan mertua tercinta yang tidak pernah lelah memberikan kasih sayang dan tiada henti mengangkat kedua tangannya untuk kebaikan dan kesuksesan penulis, yaitu Ibu Euis Elli (Almh.), Bapak Entis Sutisna, Ibu Sriningsih (Almh.), dan Bapak Mustari Alamsyah Karopeboka (Alm.). Beliau-beliaulah salah satu alasan bagi penulis untuk meraih jabatan akademik tertinggi dalam perjalanan karir penulis. Semoga Allah Swt. selalu merahmati serta memberikan kedudukan mulia di dunia dan akhirat. Ucapan terima kasih juga penulis sampaikan kepada kakak-kakak dan seluruh keluarga besar yang selalu memberikan dukungan, semangat, doa, dan bantuan.

Terakhir, namun tak kalah penting, penulis sampaikan ucapan terima kasih yang tulus kepada suami tercinta, Barian Karopeboka, M.T., serta anak-anak terkasih Arifah Nabilah Karopeboka, Dzakhirah Wafa Haniyah Karopeboka, Eiliyah Afifa Karopeboka, dan Cordelia Azizah Karopeboka, yang selalu setia menemani dan memberikan dukungan penuh sehingga menjadi sumber kekuatan dan inspirasi bagi penulis dalam mencapai hal-hal baik di kehidupan ini.

Sekali lagi, penulis ucapkan terima kasih dan penghargaan kepada semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu per satu, tetapi telah memberikan kontribusi positif dalam perjalanan ini.

Semoga Allah Swt., Tuhan yang Mahabaik, memberikan balasan berlipat ganda atas kebaikan yang telah diberikan. Aamiin ya robbal 'alamiin.

# DAFTAR PUSTAKA

- Bagwell, P. F., dan Orlando, T. P. (1989): Landauer's conductance formula and its generalization to finite voltages, *Physical Review B*, **40**(3), 1456.
- Bahamon, D., Khalil, M., Belabbes, A., Alwahedi, Y., Vega, L. F., dan Polychronopoulou, K. (2021): A DFT study of the adsorption energy and electronic interactions of the SO<sub>2</sub> molecule on a CoP hydrotreating catalyst, *RSC Advances*, **11**(5), 2947–2957.
- Büttiker, M., Imry, Y., Landauer, R., dan Pinhas, S. (1985): Generalized many-channel conductance formula with application to small rings, *Physical Review B*, **31**(10), 6207.
- Chang, L., Yang, K. J., Yeo, Y. C., Polishchuk, I., King, T. J., dan Hu, C. (2002): Direct-tunneling gate leakage current in double-gate and ultrathin body MOSFETs, *IEEE Transactions on Electron Devices*, **49**(12), 2288–2294.
- Chaves, F., Jiménez, D., dan Suñé, J. (2012): Explicit model for direct tunneling current in double-gate MOSFETs through a dielectric stack, *Solid-State Electronics*, **76**, 19–24.
- Cheng, H., Uno, S., Numata, T., dan Nakazato, K. (2013): Analytic compact model of ballistic and quasi-ballistic cylindrical gate-all-around metal-oxide-semiconductor field effect transistors including two subbands, *Japanese Journal of Applied Physics*, **52**(4 PART 2), 04CN03.
- Chowdhury, N. A., dan Misra, D. (2007): Charge Trapping at Deep States in Hf-Silicate Based High- $\kappa$  Gate Dielectrics, *Journal of The Electrochemical Society*, **154**(2), G30.
- Copel, M., Gribelyuk, M., dan Gusev, E. (2000): Structure and stability of ultrathin zirconium oxide layers on Si(001), *Applied Physics Letters*, **76**(4), 436–438.
- Fatahilah, M. F., Yu, F., Stempel, K., Römer, F., Maradan, D., Meneghini, M., Bakin, A., Hohls, F., Schumacher, H. W., Witzigmann, B., Waag, A., dan Wasisto, H. S. (2019): Top-down GaN nanowire transistors with nearly zero gate hysteresis for parallel vertical electronics, *Scientific Reports 2019* **9**:1, **9**(1), 1–11.
- Ferrari, G., Watling, J. R., Roy, S., Barker, J. R., dan Asenov, A. (2007): Beyond SiO<sub>2</sub> technology: Simulation of the impact of high- $\kappa$  dielectrics on mobility, *Journal of Non-Crystalline Solids*, **353**(5–7), 630–634.
- Giannozzi, P., Andreussi, O., Brumme, T., Bunau, O., Buongiorno Nardelli, M., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Cococcioni, M.,

- Colonna, N., Carnimeo, I., Dal Corso, A., De Gironcoli, S., Delugas, P., Distasio, R. A., Ferretti, A., Floris, A., Fratesi, G., Fugallo, G., Gebauer, R., Gerstmann, U., Giustino, F., Gorni, T., Jia, J., Kawamura, M., Ko, H. Y., Kokalj, A., Küçükbenli, E., Lazzeri, M., Marsili, M., Marzari, N., Mauri, F., Nguyen, N. L., Nguyen, H. V., Otero-De-La-Roza, A., Paulatto, L., Poncé, S., Rocca, D., Sabatini, R., Santra, B., Schlipf, M., Seitsonen, A. P., Smogunov, A., Timrov, I., Thonhauser, T., Umari, P., Vast, N., Wu, X., dan Baroni, S. (2017): Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO, *Journal of Physics Condensed Matter*, **29**(46), 465901.
- Giannozzi, Paolo, 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., Martin-Samos, L., Marzari, N., Mauri, F., Mazzarello, R., Paolini, S., Pasquarello, A., Paulatto, L., Sbraccia, C., Scandolo, S., Sclauzero, G., Seitsonen, A. P., Smogunov, A., Umari, P., dan 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), 395502.
- Green, M. L., Gusev, E. P., Degraeve, R., dan Garfunkel, E. L. (2001): Ultrathin (<4 nm) SiO<sub>2</sub> and Si-O-N gate dielectric layers for silicon microelectronics: Understanding the processing, structure, and physical and electrical limits, *Journal of Applied Physics*, **90**(5), 2057–2121.
- Gusev, E. P., Cabral, C., Copel, M., D’Emic, C., dan Gribelyuk, M. (2003): Ultrathin HfO<sub>2</sub> films grown on silicon by atomic layer deposition for advanced gate dielectrics applications, *Microelectronic Engineering*, **69**(2–4), 145–151.
- He, Y., Wang, H., Jiang, S., dan Mo, Y. (2019): A first-principles study of the effect of surface oxygen during the early stage of graphene growth on a Cu(1 1 1) surface, *Computational Materials Science*, **168**, 17–24.
- Hu, G., Tang, Q., dan Jiang, D. E. (2016): CoP for hydrogen evolution: implications from hydrogen adsorption, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **18**(34), 23864–23871.
- Huang, M., Bakharev, P. V., Wang, Z. J., Biswal, M., Yang, Z., Jin, S., Wang, B., Park, H. J., Li, Y., Qu, D., Kwon, Y., Chen, X., Lee, S. H., Willinger, M. G., Yoo, W. J., Lee, Z., dan Ruoff, R. S. (2020): Large-area single-crystal AB-bilayer and ABA-trilayer graphene grown on a Cu/Ni(111) foil, *Nature Nanotechnology*, **15**(4), 289–295.
- Huang, M., Biswal, M., Park, H. J., Jin, S., Qu, D., Hong, S., Zhu, Z., Qiu, L., Luo, D., Liu, X., Yang, Z., Liu, Z., Huang, Y., Lim, H., Yoo, W. J., Ding, F., Wang, Y., Lee, Z., dan Ruoff, R. S. (2018): Highly Oriented Monolayer

- Graphene Grown on a Cu/Ni(111) Alloy Foil, *ACS Nano*, **12**(6), 6117–6127.
- Kawamoto, A., Cho, K., dan Dutton, R. (2001): Perspective paper: First principles modeling of high-k gate dielectrics, *Journal of Computer-Aided Materials Design*, **8**(1), 39–57.
- Khairurrijal, Noor, F. A., Abdullah, M., Sukirno, dan Miyazaki, S. (2009): Theoretical Study on Leakage Current in MOS with High-K Dielectric Stack: Effects of In-plane-Longitudinal Kinetic Energy Coupling and Anisotropic Masses, *Transactions of the Materials Research Society of Japan*, **34**(2), 291–295.
- Kim, M. S., Ko, Y. D., Yun, M., Hong, J. H., Jeong, M. C., Myoung, J. M., dan Yun, I. (2005): Characterization and process effects of HfO<sub>2</sub> thin films grown by metal-organic molecular beam epitaxy, *Materials Science and Engineering: B*, **123**(1), 20–30.
- Li, K., He, C., Jiao, M., Wang, Y., dan Wu, Z. (2014): A first-principles study on the role of hydrogen in early stage of graphene growth during the CH<sub>4</sub> dissociation on Cu(111) and Ni(111) surfaces, *Carbon*, **74**, 255–265.
- Liu, X., Fu, L., Liu, N., Gao, T., Zhang, Y., Liao, L., dan Liu, Z. (2011): Segregation Growth of Graphene on Cu–Ni Alloy for Precise Layer Control, *Journal of Physical Chemistry C*, **115**(24), 11976–11982.
- Mizuno, T., Sugiyama, N., Tezuka, T., Moriyama, Y., Nakaharai, S., Maeda, T., dan Takagi, S. (2005): High-speed source-heterojunction-MOS-transistor (SHOT) utilizing high-velocity electron injection, *IEEE Transactions on Electron Devices*, **52**(12), 2690–2696.
- Nagaraju, P. V., dan Dasgupta, A. (2006): Study of gate leakage current in symmetric double gate MOSFETs with high- $\kappa$ /stacked dielectrics, *Thin Solid Films*, **504**(1–2), 317–320.
- Noor, F. A., Abdullah, M., Sukirno, Khairurrijal, Ohta, A., and Miyazaki, S. (2010a): Electron and hole components of tunneling currents through an interfacial oxide-high-k gate stack in metal-oxide-semiconductor capacitors, *Journal of Applied Physics*, **108**, 093711.
- Noor, F. A., Abdullah, M., Sukirno, dan Khairurrijal (2010b): Comparison of Electron Transmittances and Tunneling Currents in an Anisotropic TiN<sub>x</sub>/HfO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>/p-Si(100) Metal-Oxide-Semiconductor (MOS) Capacitor Calculated Using Exponential- and Airy-Wavefunction Approaches and a Transfer Matrix Method, *Journal of Semiconductors*, **31**, 124002.
- Noor, F. A., Abdullah, M., Sukirno, dan Khairurrijal (2010c): Analysis of Electron Direct Tunneling Current through Very-Thin Gate Oxides in MOS Capacitors with the Parallel-Perpendicular Kinetic Energy Components and Anisotropic Masses, *Brazilian Journal of Physics*, **40**,

404–408.

- Noor, F. A., Iskandar, F., Abdullah, M., dan Khairurrijal (2012): Numerical Simulation of Tunneling Current in an Anisotropic Metal-Oxide-Semiconductor Capacitor, *TELKOMNIKA (Telecommunication Computing Electronics and Control)*, **10**(3), 477–485.
- Noor, F. A., Abdullah, M., dan Khairurrijal (2014a): The Effects of Nitrogen Concentration in TiN<sub>x</sub> and the Thickness of HfSiO<sub>x</sub>N to the Tunneling Currents in Isotropic TiN<sub>x</sub>/HfSiO<sub>x</sub>N/SiO<sub>2</sub>/Si(100) Capacitors, *Applied Mechanics and Materials*, **481**, 121–124.
- Noor, F. A., Khairiah, Abdullah, M., dan Khairurrijal (2014b): A Theoretical Study on Electron Tunneling Current in Isotropic High- $\kappa$  Dielectric Stack-Based MOS Capacitors with Charge Trapping, *Advanced Materials Research*, **896**, 363–366.
- Noor, F. A., Syariati, R., Suhendi, E., Abdullah, M., dan Khairurrijal (2015): Electron Tunneling Current in an n-p-n Bipolar Transistor Based on Armchair Graphene Nanoribbon by Using Airy-Wavefunction Approach, *Advanced Materials Research*, **1112**, 80–84.
- Noor, F. A., Bimo, C., Syuhada, I., Winata, T., dan Khairurrijal, K. (2019): A compact model for gate tunneling currents in undoped cylindrical surrounding-gate metal-oxide-semiconductor field-effect transistors, *Microelectronic Engineering*, **216**, 111086.
- Noor, F. A., Syuhada, I., Winata, T., Yu, F., Fatahilah, M. F., Wasisto, H. S., dan Khairurrijal, K. (2021): Investigation of Electrical Behaviors Observed in Vertical GaN Nanowire Transistors Using Extended Landauer-Büttiker Formula, *IEEE Access*, **9**, 2913–2923.
- Packan, P. A. (1999): Pushing the Limits, *Science*, **285**(5436), 2079–2081.
- Pai, W. W., Jeng, H. T., Cheng, C. M., Lin, C. H., Xiao, X., Zhao, A., Zhang, X., Xu, G., Shi, X. Q., Van Hove, M. A., Hsue, C. S., dan Tsuei, K. D. (2010): Optimal electron doping of a C<sub>60</sub> monolayer on Cu(111) via interface reconstruction, *Physical Review Letters*, **104**(3), 036103.
- Pang, X., Yang, J., Pang, M., dan Zhao, Y. (2020): Enhanced C atom adsorption on Cu ( 111 ) substrate by doping rare earth element Y for Cu e diamond composites : A fi rst-principles study, *Journal of Alloys and Compounds*, **831**, 154747.
- Reusch, D., dan Strydom, J. (2015): Evaluation of gallium nitride transistors in high frequency resonant and soft-switching DC-DC Converters, *IEEE Transactions on Power Electronics*, **30**(9), 5151–5158.
- Shu, H., Tao, X. M., dan Ding, F. (2015): What are the active carbon species during graphene chemical vapor deposition growth?, *Nanoscale*, **7**(5),

1627–1634.

- Smaani, B., Latreche, S., dan Iñiguez, B. (2013): Compact drain-current model for undoped cylindrical surrounding-gate metal-oxide-semiconductor field effect transistors including short channel effects, *Journal of Applied Physics*, **114**(22).
- Sze, S. M., dan Ng, K. K. (2006): Physics of Semiconductor Devices, *Physics of Semiconductor Devices*.
- Wu, T., Zhang, X., Yuan, Q., Xue, J., Lu, G., Liu, Z., Wang, H., Wang, H., Ding, F., Yu, Q., Xie, X., dan Jiang, M. (2015): Fast growth of inch-sized single-crystalline graphene from a controlled single nucleus on Cu–Ni alloys, *Nature Materials* 2015 15:1, **15**(1), 43–47.
- Yu, F., Rümmler, D., Hartmann, J., Caccamo, L., Schimpke, T., Strassburg, M., Gad, A. E., Bakin, A., Wehmann, H. H., Witzigmann, B., Wasisto, H. S., dan Waag, A. (2016): Vertical architecture for enhancement mode power transistors based on GaN nanowires, *Applied Physics Letters*, **108**(21).
- Yutomo, E. B., Noor, F. A., dan Winata, T. (2022): Surface stability and electronic structure of CuNi alloy (111) as a potential catalyst for graphene growth—a density-functional theory study, *Journal of Physics: Conference Series*, **2243**(1).
- Yutomo, Erik Bhekti, Noor, F. A., dan Winata, T. (2022b): Effect of Ni atomic fraction on active species of graphene growth on Cu–Ni alloy catalysts: a density functional theory study, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 708–723.
- Yutomo, Erik Bhekti, Noor, F. A., Winata, T., Yulianto, B., dan Abdullah, H. (2023): Theoretical insights on the effect of alloying with Co in the mechanism of graphene growth on a CuCo (1 1 1) catalyst, *Applied Surface Science*, **631**, 157500.
- Zhang, W., Huang, X., Liu, Z., Lee, F. C., She, S., Du, W., dan Li, Q. (2016): A New Package of High-Voltage Cascode Gallium Nitride Device for Megahertz Operation, *IEEE Transactions on Power Electronics*, **31**(2), 1344–1353.





# CURRICULUM VITAE



Nama : Prof. Dr. Fatimah Arofiati Noor  
Tempat/tgl lahir : Bandung/ 8 Oktober 1981  
Kel. Keahlian : Fisika dan Teknologi Material Maju  
Alamat Kantor : Jl. Ganesa no. 10 Bandung 40132  
Nama Suami : Barian Karoeboka, M.T.  
Nama Anak : 1. Arifah Nabilah Karoeboka  
2. Dzakirah Wafa Haniyah Karoeboka  
3. Eiliyah Afifa Karoeboka  
4. Cordelia Azizah Karoeboka

## I. RIWAYAT PENDIDIKAN

1. SDN Ciujung IV Bandung (1987-1993)
2. SMPN 10 Bandung (1993-1996)
3. SMAN 4 Bandung (1996-1999)
4. ITB, Sarjana Fisika (1999-2004)
5. ITB, Magister Fisika (2004-2006)
6. ITB, Doktor Fisika (2006-2010)

## II. RIWAYAT KERJA DI ITB

1. Koordinator Keuangan Program Studi di Lingkungan FMIPA (2013-2020)
2. Pejabat Perencanaan Barang Direktorat Logistik ITB (2017-2018)
3. Tim Re-akreditasi Program Studi Doktor Fisika, FMIPA ITB (2018)
4. Tim Penyusun Kurikulum Program Studi Sarjana, Magister, dan Doktor Fisika, FMIPA ITB (2019)
5. Tim Re-akreditasi Badan Akreditasi Nasional Perguruan Tinggi Program Studi Magister Fisika, FMIPA ITB (2019)
6. Pejabat Pemilih Penyedia Barang/Jasa Direktorat Logistik ITB (2019)
7. Koordinator Tim Pengembangan platform e-commerce Direktorat Logistik ITB (2019)
8. Tim Sosialisasi dan Implementasi Manajemen Mutu ISO 9001:2015 FMIPA ITB (2021-2023)
9. Tim Pengkajian Kurikulum Program Studi Sarjana, Magister, dan Doktor di Lingkungan FMIPA ITB (2023)

10. Tim Kurikulum Program Studi Sarjana Fisika FMIPA ITB (2024)
11. Anggota Majelis Keilmuan Fisika di Lingkungan FMIPA (2021-sekarang)
12. Assesor BKD FMIPA ITB (2021-sekarang)
13. Ketua Program Studi Sarjana Fisika FMIPA ITB (2021-sekarang)

### **III. RIWAYAT KEPANGKATAN**

1. Penata Muda Tk.I – III/b : 1 Desember 2009
2. Penata – III/c : 1 April 2012
3. Penata Tk.I – III/d : 1 Oktober 2017
4. Pembina – III/d : 1 Oktober 2019

### **IV. RIWAYAT JABATAN FUNGSIONAL**

1. Lektor : 1 Februari 2011
2. Lektor Kepala : 1 Mei 2017
3. Guru Besar : 1 Juni 2023

### **V. KEGIATAN PENELITIAN**

1. Principal Investigator, Program Penelitian, Pengabdian Masyarakat, dan Inovasi ITB (PPMI ITB), Research on “Studi Sifat Elektronik dan Optik Grafena Multilayer-Empat Lapis untuk Aplikasi Divais Sel Surya”, (Investigators: Prof. Toto Winata, Ph.D., Pipit Fitriani, Ph.D., Dr. Nur Asiah Aprianti), 2024.
2. Investigator, Program Penelitian, Pengabdian Masyarakat, dan Inovasi ITB (PPMI ITB), Research on “Optimasi Penumbuhan Carbon Nanotube (CNT) dengan Menggunakan Katalis Nikel Pada Temperatur Rendah dengan Menggunakan Metode HWC-VHF-PECVD”, (Principal Investigator: Prof. Toto Winata, Ph.D.), 2024.
3. Investigator, Riset Peningkatan Kapasitas Dosen Muda ITB, Research on “Kajian Efek Hall Orbital Pada Lapisan Logam Magnetik Untuk Aplikasi Peranti Orbitronika”, (Principal Investigator: Dr. Abdul Muizz Tri Pradipto), 2024.
4. Investigator, Riset Peningkatan Kapasitas Dosen Muda ITB, Reaearch on “Pengembangan Material 2D MXene via Molten Salt Etching dan Studi Potensi Aplikasi Bidang Semikonduktor melalui Pendekatan Komputasi”, (Principal Investigator: Pipit Fitriani, Ph.D.), 2024.

5. Principal Investigator, Program Riset ITB, Research on “Studi Teori Fungsional Kerapatan dan Persamaan Boltzmann pada Grafena Multilayer untuk Aplikasi Elektroda Konduktif Transparan pada Sel Surya”, (Investigators: Prof. Dr.Eng. Khairurrijal, Prof. Dr. Toto Winata, Dr. Ibnu Syuhada, Erik Bhekti Yutomo), 2023.
6. Principal Investigator, Program Riset PMDSU DIKTI, Research on “Model Kompak baru Arus non Linear Above Threshold dalam Divais Transistor berbasis Vertikal GaN Nanowires”, (Investigator: Prof. Dr.Eng. Khairurrijal), 2023.
7. Principal Investigator, Program Riset PDUPT DIKTI, Research on “Simulasi Tunneling dalam Flash Memory dengan Menyertakan Perangkat Muatan untuk Menghasilkan Divais Berkinerja Baik”, (Investigators: Prof. Toto Winata, Ph.D., Gilang Mardian Kartiwa, M.Si), 2023.
8. Investigator, Program Penelitian, Pengabdian Masyarakat, dan Inovasi ITB (PPMI ITB), Research on “Studi mekanisme pembentukan grafena multilayer yang ditumbuhkan diatas katalis paduan Cu-Ni dengan menggunakan metode Ab-initio molecular dynamics (AIMD)”, (Principal Investigator: Prof. Toto Winata, Ph.D.), 2023.
9. Investigator, Program Penelitian, Pengabdian Masyarakat, dan Inovasi ITB (PPMI ITB), Research on “Optimasi Penumbuhan Lapisan Grafena dengan katalis Nikel (Ni) dan Paduan Tembaga-Nikel (Cu-Ni) Menggunakan Metode HWC-VHF-PECVD”, (Principal Investigator: Dr. Euis Sustini), 2023.
10. Principal Investigator, Program Riset ITB, Research on “Model Sederhana Pendekatan Integral Fermi Dirac untuk Menganalisis Sifat Fisis Divais Semikonduktor dengan Mudah, Cepat dan Akurat”, (Investigator: Prof. Dr.Eng. Khairurrijal), 2022.
11. Principal Investigator, Program Pengabdian kepada Masyarakat ITB, Research on “Pelatihan Pembuatan Peralatan Pertanian dan Peternakan Tepat Guna untuk Pemberdayaan Masyarakat di Kecamatan Cikeusik Pandeglang”, (Investigator: Prof. Dr.Eng. Khairurrijal), 2022.

12. Principal Investigator, Program Riset PDUPT DIKTI, Research on “Simulasi Tunneling dalam Flash Memory dengan Menyertakan Perangkat Muatan untuk Menghasilkan Divais Berkinerja Baik”, (Investigator: Prof. Toto Winata, Ph.D.), 2022.
13. Principal Investigator, Program Penelitian, Pengabdian Masyarakat, dan Inovasi ITB (PPMI ITB), Research on “The Optical Response of Metallic Spherical Core-Shell Nanoparticles”, (Investigator: Prof. Toto Winata, Ph.D.), 2022.
14. Investigator, Program Penelitian, Pengabdian Masyarakat, dan Inovasi ITB (PPMI ITB), Research on “Studi disosiasi sumber karbon aktif diatas katalis paduan CuM (M=Ni, Co) sebagai tahapan awal penumbuhan grafena menggunakan metode DFT”, (Principle Investigator: Prof. Toto Winata), 2022.
15. Investigator, Program Riset Pendidikan Magister menuju Doktor untuk Sarjana Unggul (PMDSU), Research on “Simulasi Penumbuhan Grafena pada Katalis Logam Transisi dengan Menggunakan Metode Density Functional Theory (DFT)”, (Principal Investigator: Toto Winata), 2020-2022.
16. Principal Investigator, Program Riset ITB, Research on “A Compact Model of Nonlinear Current in Vertical Architecture Transistor based on GaN Nanowires for the Next Generation Design”, (Investigator: Prof. Dr.Eng. Khairurrijal), 2021
17. Principal Investigator, Program Penelitian, Pengabdian Masyarakat, dan Inovasi ITB (PPMI ITB), Research on “Analisis Karakteristik Arus dalam Divais Nanowire Transistor dengan Menggunakan Model Balistik”, (Investigators: Prof. Dr.Eng. Khairurrijal, Prof. Dr.Eng. Yudi Darma), 2021
18. Principal Investigator, Program Riset Desentralisasi PDUPT DIKTI, Research on “Study analisis tumbuhan pewarna, sebagai sensitizer dan analisis kinerja Titanium Oxide (TiO<sub>2</sub>) dalam meningkatkan efisiensi Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC)”, (Investigator: Dr. Ferry Iskandar), 2020-2021
19. Investigator, Program Penelitian, Pengabdian kepada Masyarakat dan Inovasi ITB (P3MI ITB), Research on “Pengembangan Potensial Interatomik Redefinisi Orde Ikatan sebagai Alternatif Lain dari

- Machine Learning pada Simulasi Dinamika Molekul” (Principal Investigator: Toto Winata), 2020.
20. Principal Investigator, Program Riset ITB, Research on “Distribusi Fermi-Dirac untuk Divais MOSFET GaN Silinder Nanomaterial sebagai Solusi Model Arus Darin-Source”, (Investigator: Dr.Eng. Yudi Darma), 2019.
  21. Principal Investigator, Program Penelitian, Pengabdian kepada Masyarakat dan Inovasi ITB (P3MI ITB), Research on “Pengaruh doping dan vakansi atom terhadap sifat elektronik, optik, plasmonik sistem dua dimensi  $\alpha$ -PbO”, (Investigator: Dr.Eng. Yudi Darma), 2019.
  22. Principal Investigator, Program Riset Desentralisasi PDUPT DIKTI, Research on “Pemodelan Arus Tunneling dalam Non-Volatile Memory untuk Menghasilkan Piranti Mikroelektronik dengan Unjuk Kerja yang Baik”, (Investigators: Dr. Euis Sustini, Dr. Muhammad Amin Sulthoni), 2018-2019.
  23. Principal Investigator, Program Riset Desentralisasi PDUPT DIKTI, Research on “Simulasi Arus Tunneling pada Devais Elektronik dengan Melibatkan Pengaruh Polarisasi Spin”, (Investigators: Dr.Eng. Yudi Darma, Dr. Euis Sustini), 2018-2019.
  24. Principal Investigator, Program Riset ITB, Research on “Simulasi Tunneling Bergantung Spin dalam Divais Magnetic Tunnel Junction”, (Investigators: Dr.Eng. Yudi Darma, Dhewa Edikresnha, M.Si), 2018-2019.
  25. Investigator, Program Riset Desentralisasi PDUPT DIKTI, Research on “Study Density Functional Theory terhadap Interaksi Perak-Karbon”, (Principal Investigator: Prof. Dr. Toto Winata), 2018-2019.
  26. Investigator, Hibah Desentralisasi PTUPT DIKTI Research Grant, Research on “Simulasi Atomik Penumbuhan carbon Nanotubes pada Reaktor HWC-VHF-PECVD”, (Principal Investigator: Prof. Dr. Toto Winata), 2018-2019.
  27. Principal Investigator, Program Penelitian, Pengabdian kepada Masyarakat dan Inovasi ITB (P3MI ITB), Research on “Fenomena Tunneling dalam Divais Elektronik”, (Investigator: Prof. Dr.Eng. Khairurrijal), 2018.

28. Principal Investigator, Program Penelitian Luar Negeri WCU ITB, Research on “Pemodelan Arus Drain dalam Surrounding Gate Nano Wire Transistor (SGNW Transistor) berbasis GaN untuk Menghasilkan Divais Berkecepatan Tinggi”, (Investigator: Dr.-Ing. Hutomo Suryo Wasisto), 2018.
29. Investigator, Hibah Desentralisasi PTUPT DIKTI Research Grant, Research on “Pemodelan dan Simulasi Elektronik Grafena Bilayer dan Armchair Graphene Nanoribbon (AGNR) Bilayer untuk TunnelField Effect Transistor (TFET) KecepatanTinggi”, (Principal Investigator: Dr. Euis Sustini), 2018.
30. Investigator, Hibah Desentralisasi PTUPT DIKTI Research Grant, Research on “Perancangan dan Pengembangan Flash Memory dengan Teknologi CMOS 130 nm Double Poly untuk System-on-Chip Aplikasi Internet-of-Things”, (Principal Investigator: Dr. Irman Idris, M.Sc), 2018
31. Investigator, Program Riset ITB, Research on “Simulasi Metal Katalis untuk Penumbuhan Graphene dengan Metode Molecular Dynamic”, (Principal Investigator: Prof. Dr. Toto Winata), 2018.
32. Investigator, Program Penelitian, Pengabdian kepada Masyarakat dan Inovasi ITB (P3MI ITB), Research on “Studi sifat optoelektronik terkini pada graphene dan pengembangan potensinya untuk aplikasi sel surya”, (Principal Investigator: Prof. Dr. Toto Winata), 2018
33. Principal Investigator, Hibah Desentralisasi PTUPT DIKTI Research Grant, Research on “Simulasi Arus Tunneling pada Divais Elektronik dengan Melibatkan Pengaruh Polarisasi Spin Elektron”, (Investigator: Dr. Euis Sustini), 2017.
34. Principal Investigator, Program Penelitian, Pengabdian kepada Masyarakat dan Inovasi ITB (P3MI ITB), Research on “Kajian Teoritik Sel Surya MIS untuk Menghasilkan Sel Surya dengan Unjuk Kerja yang Baik”, (Investigators: Prof. Dr.Eng. Khairurrijal, Dhewa Edikrensha, M.Si), 2017.
35. Investigator, Hibah Desentralisasi PTUPT DIKTI Research Grant, Research on “Pemodelan dan Simulasi Elektronik Grafena Bilayer dan Armchair Graphene Nanoribbon (AGNR) Bilayer untuk

- TunnelField Effect Transistor (TFET) KecepatanTinggi”, (Principal Investigator: Dr. Euis Sustini), 2017.
36. Investigator, Hibah Desentralisasi PTUPT DIKTI Research Grant, Research on “Simulasi Atomik Penumbuhan carbon Nanotubes pada Reaktor HWC-VHF-PECVD”, (Principal Investigator: Prof. Dr. Toto Winata), 2017.
  37. Principal Investigator, Hibah Desentralisasi DIKTI Research Grant, Research on “Pemodelan dan Simulasi Karakteristik Fisis Sel Surya Sambungan p-n berbasis Silikon Nanowire”, (Investigators: Prof. Dr.Eng. Khairurrijal, Dhewa Edikrensha, M.Sc), 2016.
  38. Investigator, Hibah Desentralisasi DIKTI Research Grant, Research on “Simulasi Atomistik Penumbuhan Graphene dengan Katalis Nikel pada HWC-VHF-PECVD”, (Principal Investigator: Prof. Toto Winata), 2016.
  39. Principal Investigator, Hibah Desentralisasi DIKTI Research Grant, Research on “Pemodelan Arus Drain dalam MOSFET berbasis Silikon Nanokawat dengan Melibatkan Efek Kuantum pada Lapisan Inversi”, (Investigators: Prof. Dr.Eng. Mikrajuddin Abdullah, Dhewa Edikrensha, M.Sc), 2015-2016.
  40. Investigator, Penelitian Kerjasama Antar Perguruan Tinggi, Research on “Sintesis Film Tipis BCNO Sebagai Bahan Substitusi Pada Lampu LED Putih dan Karakterisasinya dengan Menggunakan Analisis Fraktal”, (Principal Investigator: Irfana Diah Faryuni, M.Si), 2015-2016.
  41. Principal Investigator, Hibah Riset KK ITB Research Grant, Research on “Simulasi dan Pemodelan Arus Drain dalam Surrounding Gate Nano Wire MOSFET Sebagai Devais Berkecepatan Tinggi”, (Investigators: Prof. Dr.Eng. Khairurrijal, Dr.Eng. Muhammad Miftahul Munir), 2015.
  42. Principal Inverstigator, Hibah Riset KK ITB Research Grant, Research on “Modeling of Electron Leakage Current in Nano Wire MOSFET by Including the Coupling Effect of Electron Motion”, (Investigator: Prof. Dr.Eng. Khairurrijal), 2014.
  43. Principal Inverstigator, Hibah Riset KK ITB Research Grant, Research on “Modeling of Electron Tunneling Current in Spintronic Devices by

Including the Coupling Effect of Transverse and Longitudinal Kinetic Energies”, (Investigator: Prof. Dr.Eng. Khairurrijal), 2013.

44. Principal Investigator, Hibah Desentralisasi DIKTI Research Grant, Research on “Pemodelan Arus Terobosan dalam Transistor Bipolar n-p-n Berbasis Nanopita Grafena untuk Menghasilkan Devais Berkecepatan Tinggi”, (Investigators: Prof. Dr.Eng. Khairurrijal, Dr.Eng. Muhammad Miftahul munir), 2013.
45. Investigator, Hibah Kompetensi DIKTI Research Grant, Research on “Pemodelan Arus Bocor dalam Transistor Nano Metal-Oksida-Semikonduktor (MOS) Berbasis Grafena untuk Menghasilkan Devais Berkecepatan Tinggi”, (Principal Investigator: Prof. Dr.Eng. Khairurrijal), 2013-2014.
46. Investigator, Hibah Desentralisasi DIKTI Research Grant, Research on “Fabrikasi Nanofiber Komposit untuk Mendekomposisi Polutan Organik dalam Air”, (Principal Investigator: Dr.Eng. Muhammad Miftahul munir), 2013-2014.
47. Investigator, Hibah Riset KK ITB Research Grant, Research on “Fabrikasi BCNO-SiO<sub>2</sub> Nanokomposit Phosphor Untuk Aplikasi LED Putih”, (Principal Investigator: Dr.Eng. Ferry Iskandar), 2012-2013.
48. Investigator, Hibah Riset KK ITB Research Grant, Research on “Studi Penumbuhan IZO (indium Zinc Oxide) dengan metoda Spray Pyrolisis sebagai TCO pada Sel Surya”, (Principal Investigator: Dr. Euis Sustini), 2012-2013.
49. Investigator, The Asahi Glass Foundation, Research on Modeling of Leakage Current in Nano Metal-Oxide-Semiconductor (MOS) Capacitors with High-K Dielectric Stacks for High Speed MOS Devices, (Principal Investigator: Prof. Dr.Eng. Khairurrijal), 2011-2012.

## VI. PUBLIKASI

1. Achmad Nasyori\*, Fatimah Arofiati Noor, and Kurniati Abidin, “Improved the DSSCs performance by sensitizing eight natural dyes and varying the annealing process on the TiO<sub>2</sub>”, **Molecular Crystals and Liquid Crystals**, (9 January 2024). DOI:



- 10.1080/15421406.2023.2300905; ISSN: 15421406; eISSN: 15635287; SJR = 0.19, Q4; H-index = 55. (In Press)
2. Abd. Wahidin Nuayi, Fatimah Arofiati Noor\*, Euis Sustini, Irzaman, and Toto Winata, "Effect of the annealing process on Ni catalyst film grown using the vacuum thermal evaporation method", **Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures**, (11 December 2023). DOI: 10.1080/1536383X.2023.2286311; ISSN: 1536-383X; Online ISSN: 1536-4046; IF = 2,3; SJR = 0,488, Q2; H-index = 53.
  3. Erik Bhekti Yutomo, Fatimah Arofiati Noor\*, Toto Winata, Kohei Shimamura, Akihide Koura, and Fuyuki Shimojo, "Ab initio molecular dynamics of the initial growth of few-layer graphene on a Cu-Ni(111) catalys", *Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 127 (38), pp. 19258–19268 (19 September 2023). DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c04687; ISSN: 1520-5207; eISSN: 1520-6106; JIF = 3.3; SJR = 0.795, Q1; H-index = 411.
  4. Erik Bhekti Yutomo, Fatimah Arofiati Noor\*, Toto Winata, Brian Yulianto, Huda Abdullah, "Theoretical insights on the effect of alloying with Co in the mechanism of graphene growth on a Cu-Co (1 1 1) catalyst", *Applied Surface Science*, Vol. 631, pp. 157500-1/11 (15 September 2023). DOI: 10.1016/j.apsusc.2023.157500; Online ISSN: 1873-5584; Print ISSN: 0169-4332; JIF = 6.7; SJR = 1.187, Q1; H-index = 219.
  5. Erik Bhekti Yutomo, Fatimah Arofiati Noor\* and Toto Winata, " Effect of Ni atomic fraction on active species of graphene growth on Cu-Ni alloy catalyts: a density functional theory study", *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 25, Issue 1, pp. 708-723 (7 January 2023). DOI: 10.1039/D2CP04621K; ISSN: 1463-9076; IF = 3,95; SJR = 0,9, Q1; H-index = 256.
  6. Fitriyadi, Azrul Azwar, Fatimah Arofiati Noor\*, "Solar Irradiance Absorption Performance of a Spherical Multilayered Nanoparticle Coated with Graphene", *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology*, Vol. 21, pp. 310-317 (20 July 2023). DOI: 10.1380/ejssnt.2023-055; Online ISSN: 1348-0391; ISSN-L: 1348-0391; SJR = 0.201, Q4; H-index = 24.
  7. Halida Rahmi Luthfianti, William Xaveriano Waresindo, Dhewa Edikresnha, Agus Chahyadi, Tri Suciati, Fatimah Arofiati Noor, and Khairurrijal Khairurrijal\*, "Physicochemical Characteristics and

- Antibacterial Activities of Freeze-Thawed Polyvinyl Alcohol/Andrographolide Hydrogels”, ACS Omega, Vol. 8(3), pp. 2915–2930 (2023). DOI: 10.1021/acsomega.2c05110; ISSN: 2470-1343; IF = 4,132; SJR = 0,71 Q1; H-index = 55.
8. Andi Momang Yusuf, Kurniati Abidin, Ajeng Eliyana, Ida Usman, Jasruddin Daud Malago, Fatimah Arofiati Noor\* and Toto Winata, "Effect of precursor gas inlet position relative to hot wire cells in HWC-IP-PECVD systems for low-temperature graphene growth”, Materials Research Innovations, Vol. 27, Issue 3, pp. 131-137 (22 June 2022). DOI: 10.1080/14328917.2022.2091353; ISSN: 1432-8917; Online ISSN: 1433-075X; SJR = 0,31, Q3; H-index = 50.
  9. Erik Bhukti Yutomo, Fatimah Arofiati Noor\* and Toto Winata, "The effect of vacancies on the magnetic and optical properties of monolayer alpha lead oxide ( $\alpha$ -PbO): A density functional theory study”, Micro and Nanostructures, Vol. 163, pp. 107125-1/12 (2022). DOI: 10.1016/j.spmi.2021.107125; ISSN: 2773-0123; IF = 2.658; SJR = 0,493 Q2; H-index = 74.
  10. E. B. Yutomo, F. A. Noor\*, and T. Winata, “Surface stability and electronic structure of CuNi alloy (111) as a potential catalyst for graphene growth-a density-functional theory study”, The 9th Asian Physics Symposium 2021 (APS 2021) (Bandung, 5-6 October 2021), published in *IOP Conference Series: Journal of Physics*, Vol. 2243 (21 Juni 2022), pp. 012045-1/7. DOI: 10.1088/1742-6596/2243/1/012045; Online ISSN: 1742-6596; Print ISSN: 1742-6588; SJR = 0,21; H-index = 85.
  11. Fitriyadi, Azrul Azwar and Fatimah Arofiati Noor\*, “The Optical Response of Metallic Spherical Core-Shell Nanoparticles”, The 9th Asian Physics Symposium 2021 (APS 2021) (Bandung, 5-6 October 2021), published in *IOP Conference Series: Journal of Physics*, Vol. 2243 (21 Juni 2022), pp. 012086-1/5. DOI: 10.1088/1742-6596/2243/1/012086; Online ISSN: 1742-6596; Print ISSN: 1742-6588; SJR = 0,21; H-index = 85.
  12. William Xaveriano Waresindo, Halida Rahmi Luthfianti, Dhewa Edikresnha, Tri Suciati, Fatimah Arofiati Noor and Khairurrijal Khairurrijal\*, “A freeze-thaw PVA hydrogel loaded with guava leaf extract: physical and antibacterial properties”, RSC Advances, Vol. 11, pp. 30156-3017 (2021). DOI: 10.1039/d1ra04092h; ISSN: 2046-2069; Online ISSN: 2046-2069; IF = 3,119; SJR = 0,75 Q1; H-index = 148

13. Erik Bhekty Yutomo, Fatimah Arofiati Noor\* and Toto Winata, "Effect of the number of nitrogen dopants on the electronic and magnetic properties of graphitic and pyridinic N-doped graphene – a density-functional study", *RSC Advances*, Vol. 11, pp. 18371-18380 (2021). DOI: 10.1039/D1RA01095F; ISSN: 2046-2069; Online ISSN: 2046-2069; IF = 3,119; SJR = 0,75 Q1; H-index = 148.
14. Kurniati Abidin, Aveni Christy Keintjem, Andi Momang Yusuf, Ajeng Eliyana, Jasruddin Daud Malago, Fatimah Arofiati Noor\*, and Toto Winata, "Optimization of Ag Catalyst Growth by Vacuum Thermal Evaporation", *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, (2021) DOI: 10.1080/1536383X.2021.1881775; ISSN: 1536-383X; Online ISSN: 1536-4046; IF = 1,648; SJR = 0,36 Q2, H-index = 46.
15. Ibnu Syuhada, Nikodemus Umbu Janga Hauwali, Ahmad Rosikhin, Euis Sustini, Fatimah Arofiati Noor\*, and Toto Winata, "Bond Order Redefinition Needed to Reduce Inherent Noise in Molecular Dynamics Simulations", *Scientific Reports*, Vol. 11, pp. 3674-1/12 (2021). DOI: 10.1038/s41598-020-80217-0; Online ISSN: 2045-2322; IF = 3,998; SJR = 1,34 Q1, H-index = 179.
16. Fatimah Arofiati Noor\*, Ibnu Syuhada, Toto Winata, Feng Yu, Muhammad Fahlesa Fatahilah, Hutomo Suryo Wasisto, and Khairurrijal Khairurrijal, "Investigation of Electrical Behaviors Observed in Vertical GaN Nanowire Transistors Using Extended Landauer-Büttiker Formula", *IEEE Access*, Vol. 9, pp. 2913-2923 (2021). DOI: 10.1109/ACCESS.2020.3047498; ISSN: 2169-3536; IF = 3,745; SJR = 0,78 Q1; ; H-index = 86.
17. Achmad Nasyori and Fatimah Arofiati Noor\*, "Concentrating Yellow and Red Gambier Fruit (*Uncaria*) in Isopropyl Alcohol to Improve the Performance of Dye-Sensitised Solar Cells", *The 10th International Conference on Theoretical and Applied Physics (ICTAP)* (Online, 20-22 November 2020), published in *IOP Conference Series: Journal of Physics*, Vol. 1816 (8 Maret 2021), pp. 012023-1/7. DOI: 10.1088/1742-6596/1816/1/012023. Online ISSN: 1742-6596; Print ISSN: 1742-6588; SJR = 0,23; H-index = 70.
18. A. Nasyori and F. A. Noor\*, "Effect of Natural Dye Extracting Solvents on the Performance of Dye-Sensitised Solar Cells", *The 1st International Symposium on Physics and Applications (ISPA 2020)* (Online, 17-18 Desember 2020), published in *IOP Conference Series:*

- Journal of Physics*, Vol. 1951 (Mei 2021), pp. 012027-1/7. DOI: .10.1088/1742-6596/1951/1/012027; SJR = 0,23; H-index = 70.
19. E. B. Yutomo, F. A. Noor\*, and T. Winata, "Investigation of the Magnetic and Electronic Properties of Pyrrolic N-doped Graphene Using Density Functional Theory", The 1st International Symposium on Physics and Applications (ISPA 2020) (Online, 17-18 Desember 2020), published in *IOP Conference Series: Journal of Physics*, Vol. 1951 (Mei 2021), pp. 012016-1/7. DOI: 10.1088/1742-6596/1951/1/012016; SJR = 0,23; H-index = 70.
  20. Fatimah Arofiati Noor\*, Hantika Mardianti, and Khairurrijal, "Modeling of Electron Transmittance in Magnetic Tunnel Junctions", The 7th International Conference on Advanced Materials Science and Technology 2019 (ICAMST 2019) (Bandung, 25-26 September 2019), published in *Materials Today: Proceeding*, Vol. 44 (April 2021), pp. A9-A11. DOI: 10.1016/j.matpr.2021.04.346; ISSN: 2214-7853; SJR = 0,3; H-index = 27.
  21. Fatimah Arofiati Noor\*, Hantika Mardianti, Khairurrijal, "Modeling of Spin-Polarized Currents in Zinc Blende-based Magnetic Tunnel Junctions Featuring the Dresselhaus Effect", The 2nd International Conference on Science and Technology Applications (ICoSTA) (Medan, 3 November 2020), published in *IOP Conference Series: Journal of Physics*, Vol. 1811 (23 March 2021), pp. 012067-1/8. DOI: 10.1088/1742-6596/1811/1/012114; Online ISSN: 1742-6596; Print ISSN: 1742-6588; SJR = 0,23; H-index = 70.
  22. A. Nasyori and F. A. Noor\*, "The Effects of the Concentration of Red and Yellow Gambier Fruit Dyes on the Short-Circuit Photocurrent in Dye-Sensitised Solar Cells ", The 2nd International Conference on Science and Technology Applications (ICoSTA) (Medan, 3 November 2020), published in *IOP Conference Series: Journal of Physics*, Vol. 1811 (23 March 2021), pp. 012114-1/7. DOI: 10.1088/1742-6596/1811/1/012067; Online ISSN: 1742-6596; Print ISSN: 1742-6588; SJR 2019 = 0,23; H-index = 70.
  23. Kurniati Abidin, Momang A.Yusuf, Ajeng Eliyana, Fatimah A. Noor\*, Jasruddin D.Malago, Toto Winata, "Study of Growth of Silver Nano Catalyst for Carbon Nano Tube Growth", *Materials Today: Proceedings* (published 23 januari 2021).

24. Shibgatullah Muhammady, Fatimah Arofiati Noor, Rena Widita, Yudi Darma\*, “Ferromagnetism and structural deformation in monolayer alpha lead oxide induced by N and F doping: New insights from first principles”, *International Journal of Quantum Chemistry*, Vol. (June 2020) pp. 118-123. Q1 (eISSN: 1097-461X). <https://doi.org/10.1002/qua.26268>
25. Shibgatullah Muhammady, Risa Suryana, Fatimah Arofiati Noor, Yudi Darma\*, “The first principle calculation of elemental-vacancy-assisted modifications on structural properties and optical responses of ZnO system”, *Progress in Natural Science: Materials International*, Vol. 30(1), (February 2020) pp. 118-123. (ISSN: 1002-0071). Doi: <https://doi.org/10.1016/j.pnsc.2020.01.014>.
26. Fatimah A. Noor\*, Ezra Nabila, Euis Sustini, Khairurrijal Khairurrijal, “Electron Spin-Dependent Tunneling Current through a Trapezoidal Potential Barrier under Airy Wavefunction Approach”, *Key Engineering Materials*, Vol. 833 (2020), pp. 152-156 (6 Maret 2020). (ISSN: 1662-9795,). doi: 10.4028/www.scientific.net/KEM.833.152
27. Fatimah A. Noor\*, Christoforus Bimo, Ibnu Syuhada, Toto Winata, Khairurrijal Khairurrijal, “A compact model for gate tunneling currents in undoped cylindrical surrounding-gate metal-oxide-semiconductor field-effect transistors”, *Microelectronic Engineering*, Vol. 216 (15 Agustus 2019), pp. 111086-1/5. Q2 (ISSN: 0167-9317). doi: <https://doi.org/10.1016/j.mee.2019.111086>
28. Endi Suhendi\*, Lilik Hasanah, Dadi Rusdiana, Fatimah A. Noor, Neny Kurniasih, Khairurrijal, “Comparison of tunneling currents in graphene nanoribbon tunnel field effect transistors calculated using Dirac-like equation and Schrödinger's equation”, *Journal of Semiconductors*, Vol. 40 (6) (Juni 2019), pp. 062002-1/5. (ISSN: 16744926). doi: <https://doi.org/10.1088/1674-4926/40/6/062002>.
29. Momang A. Yusuf, Ahmad Rosikhin, Jasruddin D. Malago, Fatimah A. Noor, and Toto Winata\*, “Low temperature graphene growth effort on corning glass substrate by using VHF-IP HWC-PECVD”, *Materials Science Forum*, Vol. 966 (6 October 2019), pp. 100-106. (ISSN: 1662-9752). Doi: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.966.100>
30. Fatimah A. Noor\*, Ezra Nabila, Hantika Mardianti, Tisa I. Ariani, Khairurrijal, “Modeling of Electron Transmittance and Tunneling Current through a Trapezoidal Potential Barrier by Considering the

Spin Polarization Effect”, 7th Asian Physics Symposium (APS 2017) (Bandung, 29-31 Agustus 2017), published in *IOP Conference Series: Journal of Physics*, Vol. 1024 (7 May 2019), pp. 012114-1/5. (Online ISSN: 1742-6596, Print ISSN: 1742-6588). doi: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1204/1/012114>.

31. Gilang Mardian Kartiwa, Muhammad Amin Sulthoni, and Fatimah Arofiati Noor\*, “Fowler--Nordheim Tunneling at Sharp-Shaped Floating Gate Structure Modeled as Triangular Electrode”, *International Journal of Electronics and Electrical Engineering*, Vol. 7, No. 4, (December 2019), pp. 79-82. (ISSN: 2301-380X). doi: [10.18178/ijeee.7.4.79-82](https://doi.org/10.18178/ijeee.7.4.79-82)
32. Rinaldo Marimpul, Toto Winata\*, Fatimah Arofiati Noor, Ibnu Syuhada and Ahmad Rosikhin, “Molecular dynamics simulation of platinum film growth based on thermal evaporation method”, 3rd Materials Research Society of Indonesia Meeting, MRS-Id 2018 (31 July 2018 - 2 August 2018, Published in *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, Vol. 622, Issue 1, (4 November 2019), pp. 012015-1/5. doi: <https://doi.org/10.1088/1757-899X/622/1/012015>. Online ISSN: 1757-899X, Print ISSN: 1757-8981. <https://iopscience.iop.org/journal/1757-899X>
33. Gilang M. kartiwa, Fatimah A. Noor\*, Muhammad A. Sulthoni, “Electron Transmittance Profile through Non-linear Potential Barrier of Sharp-shaped Electrode”, *Proceeding - 2019 International Symposium on Electronics and Smart Devices*, ISESD 2019
34. Endi Suhendi\*, Lilik Hasanah, Fatimah A. Noor, Neny Kurniasih, Khairurrijal, “Modeling of Armchair Graphene Nanoribbon Tunnel Field Effect Transistors for Low Power Applications”, *Journal of Semiconductor Technology and Science*, Vol. 19 (4) (Agustus 2019), pp. 336-346. (eISSN: 2233-4866). Doi: <https://doi.org/10.5573/JSTS.2019.19.4.336>
35. Fatimah A. Noor\*, Dhewa Edikresnha, Khairurrijal, “Effect of Electron Effective Masses on Tunneling Current in Heterostructures Under Transverse-Longitudinal Kinetic Energy Coupling”, *Advanced Science Letters*, Vol. 24 (11) (2018), pp. 8695-8697, November 2018, pp. 8695-8697. (eISSN: 1936-7317). doi: <https://doi.org/10.1166/asl.2018.12327>

36. Fatimah A. Noor\*, Fandi Oktasendra, Euis Sustini, Khairurrijal, “The effects of insulator thickness and substrate doping density on the performance of ZnO/SiO<sub>2</sub> /n-Si solar cells”, *Materials Technology*, Vol. 33(14) (September 2018), pp. 865-871. Q2 (eISSN: 1753-5557). doi: <https://doi.org/10.1080/10667857.2018.1520956>.
37. Fatimah A. Noor\*, Ezra Nabila, Hantika Mardianti, Tisa I. Ariani, Khairurrijal, “Transmittance and Tunneling Current through a Trapezoidal Barrier under Spin Polarization Consideration”, *The 7th The International Conference on Theoretical and Applied Physics (ICTAP 2017) (Yogyakarta, 6-8 September 2017)*, published in *IOP Conference Series: Journal of Physics*, Vol. 1011 (2018), pp. 012047. (Online ISSN: 1742-6596 Print ISSN: 1742-6588). doi: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1011/1/012047>
38. Fatimah A. Noor\*, Euis Sustini, Mikrajuddin Abdullah, Khairurrijal, “A review of tunneling current in high-K-based MOS capacitors: Effects of transverse-longitudinal energy coupling”, *International Symposium on Electronics and Smart Devices (ISESD 2017) (Yogyakarta, 17-19 Oktober 2017)*, published in *Proceedings of the IEEE*, (2018) pp. 252-255. doi: 10.1109/ISESD.2017.8253342) (Invited Paper)
39. Euis Sustini\*, Khairurrijal, Fatimah A. Noor, Rifki Syariati, “Band Gap Calculations of Bilayer Graphene and Bilayer Armchair Graphene Nanoribbon” 5th The International Conference on Advanced Materials Science and Technology 2017 (ICAMST 2017) published in *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, Vol. 367 (2018), pp. 012013
40. Fatimah A. Noor\*, Christoforus Bimo, Khairurrijal,” Analytical Quantum Drain Current Model in Undoped Cylindrical Surrounding-Gate MOSFETs”, *Journal of Telecommunication, Electronic and Computer Engineering*, Vol. 9 (1-5), pp. 101-105 (2017). (ISSN: 2180-1843) eISSN: 2289-8131; <https://journal.utm.edu.my/index.php/jtec/> ; <https://journal.utm.edu.my/index.php/jtec/article/view/1844/1133>
41. Ibnu Syuhada, Ahmad Rosikhin, Rinaldo Marimpul, Fatimah A. Noor, Toto Winata\*, “Implementation of Hybrid MD/MC in Nickel Carbide Production: Recipe for Graphene Growth Formation”, *Materials Research Express*, Vol. 4 (2017), 024005, Februari 2017.

42. Endi Suhendi, Rifky Syariati, Fatimah A. Noor, Khairurrijal\*, “Modelling of drain current in tunnelling field-effect transistor based on strained armchair graphene nanoribbons”, 1st Annual Applied Science and Engineering Conference (AASEC) (Bandung, 16-18 November 2016), published in *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, Vol. 180 (2017), pp. 012038
43. Fatimah A. Noor\*, Ezra Nabila, Euis Sustini, Khairurrijal, “The Influence of Incident Angle of Electron to the Transmittance and Tunneling Current in Heterostructures with Bias Voltage by Considering the Spin Polarization Effect”, The 2nd Material Research Society of Indonesia Meeting (MRS-id) (Bandung, 24-26 Oktober 2016), published in *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, Vol. 214 (2017), pp. 012037 (Online ISSN: 1757-899X, Print ISSN: 1757-8981). (<https://doi.org/10.1088/1757-899X/214/1/012037>)
44. Ezra Nabila, Fatimah A. Noor, Khairurrijal\*, “Comparison of Electron Transmittance and Tunneling Current through a Trapezoidal Potential Barrier with Spin Polarization Consideration by using Analytical and Numerical Approaches”, The 2nd Material Research Society of Indonesia Meeting (MRS-id) (Bandung, 24-26 Oktober 2016), published in *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, Vol. 214 (2017), pp. 012038-1/8
45. Irfana Diah Faryuni, Joko Sampurno, Bebeh Wahid Nuryadin, Fatimah Arofiati Noor, and Ferry Iskandar\*, “Microwave Synthesis of BCNO/SiO<sub>2</sub> Nanocomposite Material”, The 2nd Material Research Society of Indonesia Meeting (MRS-id) (Bandung, 24-26 Oktober 2016), published in *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, Vol. 214 (2017), pp. 012016-1/3
46. Fatimah A. Noor\*, Christoforus Bimo, Khairurrijal, “The Influence of High- $\kappa$  Material/SiO<sub>2</sub> Gate Stacks on Direct Gate Tunneling Current of Cylindrical Surrounding-Gate MOSFETs”, *Key Engineering Materials*, Vol. 709 (2016), pp. 19-22, September 2016.
47. Christoforus Bimo, Fatimah A. Noor, Khairurrijal\*, “Compact Modeling of Quantum Effects in Undoped Long-Channel Cylindrical Surrounding-Gate MOSFETs”, Asian Physics Symposium 2015 (APS 2015) (Bandung, 19 Agustus 2015), published in *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 739 (2016), pp. 012025-1/6



48. Ibnu Syuhada, Ahmad Rosikhin, Aulia Fikri, Fatimah A. Noor, and Toto Winata\*, “Molecular Dynamics Simulation of Graphene Growth at Initial Stage on Ni(100) Facet for Low Flux C Energy Synthesized by CVD Method”, The 6th-Nanoscience and Nanotechnology Symposium (NNS) 2015 (Solo, 4-5 November 2015), published in *American Institute of Physics (AIP) Conference Proceedings*, Vol. 1710 (2016), pp. 030060-1/4.
49. A. Rosikhin, I. Syuhada, F. A. Noor, V. Suendo, T. Winata\*. “Dissipated Energi Analysis in TiO<sub>2</sub>/graphene/Si based Solar Cell in Application for Consideration of Excitons Generation Harvesting Enhancement”, *Green and Sustainable Chemistry* (Elsevier), Germany, 3 – 6 April 2016.
50. A. Rosikhin, I. Syuhada, F. A. Noor, V. Suendo, and T. Winata\*, “Analysis of Internal Transmission Properties in Graphene/Si Heterostructure”, 4th Int. Conf. on Nano and Materials Engineering, Denpasar, Bali, 7 – 8 April 2016.
51. Fatimah A. Noor\*, Endi Suhendi, Rifky Syariati, Mikrajuddin Abdullah, and Khairurrijal, “Electron Tunneling Current in an n-p-n Bipolar Transistor Based on Armchair Graphene Nanoribbon by Using Airy-Wavefunction Approach”, *Advanced Materials Research*, Vol. 1112 (2015), pp 80-84, April 2015 (ISBN-13: 978-3-03835-149-8).
52. Rifky Syariati, Endi Suhendi, Fatimah A. Noor, Khairurrijal\*, “Modeling of Electron Tunneling Current in a p-n Junction Based on Strained Armchair Graphene Nanoribbons with Extended Tight Binding and Transfer Matrix Method”, *Advanced Materials Research*, Vol. 1112 (2015), pp 102-105, April 2015 (ISBN-13: 978-3-03835-149-8).
53. Endi Suhendi, Rifky Syariati, Fatimah A. Noor, Neny Kurniasih and Khairurrijal\*, “Simulation of Dirac Tunneling Current in Armchair GrapheneNanoribbon Tunnel Transistor Using a Transfer Matrix Method”, *Advanced Materials Research*, Vol. 1112 (2015), pp 80-84, April 2015 (ISBN-13: 978-3-03835-149-8).
54. Fatimah A. Noor\*, Ferry Iskandar, Mikrajuddin Abdullah, and Khairurrijal, “Simulation of Electron Transmittance and Tunnel Current in n+Poly-Si/HfSiO<sub>x</sub>N/Trap/SiO<sub>2</sub>/Si(100) Capacitors Using Analytical and Numerical Approaches”, *Asian Physics Symposium*

- 2012 (APS 2012) (Bandung, 12-13 July 2012), published in *American Institute of Physics (AIP) Conference Proceedings*, Vol. 1656 (2015), pp. 030017-1/4.
55. Rifky Syariati, Endi Suhendi, Fatimah A. Noor, Mikrajuddin Abdullah, Khairurrijal\*, “Modeling of Electron Tunneling Current in a p-n Junction Based on Strained Armchair Graphene Nanoribbon”, *International Journal of Applied Physics and Mathematics*, Vol. 4, No. 4, July (2014), pp. 259-262.
  56. Endi Suhendi, Rifky Syariati, Fatimah A. Noor, Neny Kurniasih and Khairurrijal\*, “Simulation of Drain Currents of Double Gated Armchair Graphene Nanoribbon Field-Effect Transistors by Solving Dirac “Like” Equation and Using Transfer Matrix Method”, *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 539, 2014, pp. 012020
  57. Endi Suhendi, Rifky Syariati, Fatimah A. Noor, Neny Kurniasih and Khairurrijal\*, “Simulation of Dirac Tunneling Current of an Armchair Graphene Nanoribbon-Based p-n Junction Using a Transfer Matrix Method”, *Advanced Materials Research*, Vol. 974 (2014), pp 205-209, June 2014 (ISBN-13: 978-3-03835-149-8).
  58. Fatimah A. Noor\*, Mikrajuddin Abdullah, and Khairurrijal, “The Effects of Nitrogen Concentration in TiNx and the Thickness of HfSiOxN to the Tunneling Currents in Isotropic TiNx/HfSiOxN/SiO2/Si(100) Capacitors”, *Applied Mechanics and Materials*, Vol. 481 (2014), pp. 121-124.
  59. Fatimah A. Noor\*, Khairiah, Mikrajuddin Abdullah, and Khairurrijal, “A Theoretical Study on Electron Tunneling Current in Isotropic High- $\kappa$  Dielectric Stack-based MOS Capacitors with Charge Trapping”, *Advanced Materials Research*, Vol. 896 (2014), pp. 363-366.
  60. Endi Suhendi, Fatimah A. Noor, Neny Kurniasih, Khairurrijal\*, “Modeling of Drain Current in Armchair Graphene Nanoribbon Field Effect Transistor Using Transfer Matrix Method”, *Advanced Materials Research*, Vol. 896 (2014), pp. 367-370.
  61. Christoforus Bimo, Fatimah A. Noor, Mikrajuddin Abdullah, Khairurrijal\*, “A Theoretical Model of Band-to-band Tunneling Current in an Armchair Graphene Nanoribbon Tunnel Field-Effect Transistor “, *Advanced Materials Research*, Vol. 896 (2014), pp. 371-374.

62. Endi Suhendi, Rifky Syariati, Fatimah A. Noor, Neny Kurniasih and Khairurrijal\*, “Modeling of Dirac Electron Tunneling Current in Bipolar Transistor Based on Armchair Graphene Nanoribbon Using a Transfer Matrix Method”, 3rd International Conference on Computation for Science and Technology, September 23-25, 2014 Bali.
63. Endi Suhendi, Rifky Syariati, Fatimah A. Noor, Neny Kurniasih and Khairurrijal\*, “Model of a Tunneling Current in a p-n Junction Based on Armchair Graphene Nanoribbons – an Airy Function Approach and a Transfer Matrix Method”, International Conference on Mathematics and Natural Sciences 2012 (ICMNS 2012), published in *American Institute of Physics (AIP) Conference Proceedings*, Vol. 1589 (2014), pp. 91-94.
64. Fatimah A. Noor\*, Fandi Oktasendra, Euis Sustini, Mikrajuddin Abdullah, and Khairurrijal, “A Theoretical Study on the Performance of SnO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>/n-Si Solar Cells“, *Materials Sciences Forum*, Vol. 737 (January 2013), pp. 1-8.
65. Lilik Hasanah\*, Fatimah Arofiati Noor, Chang Uk Jung, and K. Khairurrijal, “Verification of Theoretical Model for Collector Current in SiGe-based Heterojunction Bipolar Transistors”, *Electronics Letters*, Vol. 49, No. 21 (Oct 2013), pp. 1347-1348.
66. Fatimah A. Noor\*, Khairiah, Mikrajuddin Abdullah, and Khairurrijal, “A Numerical Model of Tunneling Current in Isotropic n+Poly-Si/HfSiO<sub>x</sub>N/Trap/SiO<sub>2</sub>/Si Capacitors by Using a Transfer Matrix Method”, *Padjadjaran International Physics Symposium 2013 (PIPS 2013)* (Bandung, 7-9 May 2013), published in *American Institute of Physics (AIP) Conference Proceedings*, Vol. 1554 (2013), pp. 154-157.
67. Fatimah A. Noor\*, Ferry Iskandar, Mikrajuddin Abdullah, and Khairurrijal, “Analysis of electron leakage current in MOS capacitors by using anisotropic and isotropic mass approaches“, *Electronics Letters*, Vol. 48 (December 2012), pp. 1585-1586.
68. Fatimah A. Noor\*, Ferry Iskandar, Mikrajuddin Abdullah, and Khairurrijal, “Numerical Simulation of Tunneling Current in an Anisotropic Metal-Oxide-Semiconductor Capacitor“, *TELKOMNIKA Indonesian Journal of Electrical Engineering*, Vol. 10, No. 3 (July 2012), pp. 477-485.

69. Fatimah A. Noor\*, Muhammad F. Sahdan, Panji Achmari, Ferry Iskandar, Mikrajuddin Abdullah, and Khairurrijal, “Modeling of Electron Transmittance and Tunneling Current through an Interfacial Oxide-High-k-Gate-Stack by Including Transverse-Longitudinal Kinetic Energy Coupling and Anisotropic Masses: Effects of Metal Work Function”, The 5th International Conference on Physics and Applied Physics (Bandung, 10-11 November 2011), published in *American Institute of Physics (AIP) Conference Proceedings*, Vol. 1454 (2012), pp. 199-202.
70. Khairurrijal\*, Fatimah A. Noor, Ferry Iskandar, and Mikrajuddin Abdullah, “The Importance of Transverse-Longitudinal Energy Coupling in Modeling of Tunneling Current in Nano MOS Capacitors – A Review” International Conference on Physics and Its Application (Solo, 2-3 october 2012) (Invited)
71. Khairurrijal\*, Fatimah A. Noor, and Mikrajuddin Abdullah, “A Computational Study of Electron Direct Tunneling Current in  $TiN_x/HfSiO_xN/SiO_2/Si(100)$  High-K MOS Capacitors”, The 2nd International Conference on Computation for Science and Technology (Nigde, Turkey, 9-11 July 2012). (Invited)
72. Fatimah A. Noor\*, Muhammad F. Sahdan, Panji Achmari, Ferry Iskandar, Mikrajuddin Abdullah, and Khairurrijal, “Electron Tunnel Current through  $HfO_2/SiO_2$  Nanometer-thick Layers with a Trapped Charge: Effects of Electron Incident Angle and Silicon Substrate Orientation”, The 4th Nanoscience and Nanotechnology Symposium (NNS2011) (Bali, 23-25 September 2011), published in *American Institute of Physics (AIP) Conference Proceedings*, Vol. 1415 (2011), pp. 32-35.
73. Muhammad F. Sahdan, Panji Achmari, Fatimah A. Noor\*, Ferry Iskandar, Mikrajuddin Abdullah, and Khairurrijal, “Analysis of Electron Direct Tunneling Current through High-K Dielectrics by Including the Effect of Trap between  $HfO_2$  and  $SiO_2$  Interfaces”, The 4th Nanoscience and Nanotechnology Symposium (NNS2011) (Bali, 23-25 September 2011), published in *American Institute of Physics (AIP) Conference Proceedings*, Vol. 1415 (2011), pp. 75-78.
74. Panji Achmari, Muhammad F. Sahdan, Fatimah A. Noor\*, Ferry Iskandar, Mikrajuddin Abdullah, and Khairurrijal, “Simulation of Electron Tunnel Current through  $HfO_2/SiO_2$  Nanometer-thick Layers

- with a Trapped Charge of MOS Capacitors using Transfer Matrix Method”, The 4th Nanoscience and Nanotechnology Symposium (NNS2011) (Bali, 23-25 September 2011), published in *American Institute of Physics (AIP) Conference Proceedings*, Vol. 1415 (2011), pp. 71-74.
75. Fatimah A. Noor, Mikrajuddin Abdullah, Sukirno, Khairurrijal\*, Akio Ohta, and Seiichi Miyazaki, “Electron and hole components of tunneling currents through an interfacial oxide-high-k gate stack in metal-oxide-semiconductor capacitors”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 108 (November 2010), pp. 093711-1-093711-4.
  76. Fatimah A. Noor, Mikrajuddin Abdullah, Sukirno, and Khairurrijal\*, “Comparison of Electron Transmittances and Tunneling Currents in an Anisotropic TiN<sub>x</sub>/HfO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>/p-Si(100) Metal-Oxide-Semiconductor (MOS) Capacitor Calculated Using Exponential- and Airy-Wavefunction Approaches and a Transfer Matrix Method”, *Journal of Semiconductors*, Vol. 31 (November 2010), pp. 124002-1-124002-5.
  77. Fatimah A. Noor, Mikrajuddin Abdullah, Sukirno, and Khairurrijal\*, “Analysis of Electron Direct Tunneling Current through Very-Thin Gate Oxides in MOS Capacitors with the Parallel-Perpendicular Kinetic Energy Components and Anisotropic Masses”, *Brazilian Journal of Physics*, Vol. 40 (December 2010), pp. 404-408.
  78. Mikrajuddin Abdullah\*, Khairurrijal, Fatimah A. Noor, Ahmad R. Marully, and Muhammad Sanny, “Design of Steam Reforming Reactor for Converting Methanol into Hydrogen Using an Ultrasonic Nebulizer as Liquid Feeder and Polymer Liquid Processed CuO/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Particles as Catalyst”, *Journal of Sustainable Energy and Environment*, Vol. 1 (January 2010), pp. 11-15.

## VII. PENGHARGAAN

1. Dosen terbaik bidang pengembangan institusi/ Ketua Program Studi terbaik di lingkungan FMIPA ITB (2021)
2. Dosen terbaik bidang pengembangan institusi/ Ketua Program Studi terbaik di lingkungan FMIPA ITB (2022)
3. Penghargaan 10 tahun Satyalancana Karsa dari Presiden RI (2023)

## **VIII. SERTIFIKASI**

1. Sertifikasi tingkat dasar pengadaan barang/jasa pemerintah (2019)





📍 Gedung STP ITB, Lantai 1,  
Jl. Ganesa No. 15F Bandung 40132  
☎ +62 22 20469057  
🌐 www.itbpress.id  
✉ office@itbpress.id  
Anggota Ikapi No. 043/JBA/92  
APPTI No. 005.062.1.10.2018

### Forum Guru Besar Institut Teknologi Bandung

Jalan Dipati Ukur No. 4, Bandung 40132  
E-mail: sekretariat-fgb@itb.ac.id  
Telp. (022) 2512532

🌐 fgb.itb.ac.id    📘 FgbItb    🐦 FGB\_ITB  
📱 @fgbitb\_1920    📺 Forum Guru Besar ITB

