

**RENCANA PROGRAM DAN
KEGIATAN PEMBELAJARAN SEMESTER
(RPKPS)**



Komputasi Struktur Elektronik Zat Mampat

Semester 2/ 3 SKS / MFF 5514

Fisika

Oleh

Dr. Iman Santoso

Dr. Sholihun

**Universitas Gadjah Mada
Fakultas MIPA
2021**



Universitas Gadjah Mada

Fakultas MIPA

Program Studi S2 Fisika

RENCANA PROGRAM DAN KEGIATAN PEMBELAJARAN SEMESTER (RPKPS)

Kode Mata Kuliah	Nama Mata Kuliah	Bobot (sks)	Semester	Status Mata Kuliah	Mata Kuliah Prasyarat	
MFF 5514	Komputasi Struktur Elektronik Zat Mampat	3	2	Pilihan	-	
Capaian Pembelajaran Lulusan (CPL) yang dibebankan pada MK	CPU1	Capaian Pembelajaran Utama 1: Menguasai bidang dasar ilmu fisika yang meliputi kajian elektrodinamika, mekanika klasik, dan mekanika kuantum.				
	CPU2	Capaian Pembelajaran Utama 2: Menguasai dan mampu menerapkan salah satu bidang ilmu fisika lanjut.				
	CPU3	Capaian Pembelajaran Utama 3: Menguasai kemampuan untuk mengkaji suatu permasalahan di dalam suatu bidang fisika melalui penelitian				
	CPP2	Capaian Pembelajaran Pendukung 2: Menguasai berbagai kajian komputasi yang dapat digunakan untuk suatu bidang ilmu Fisika Lanjut.				
Capaian Pembelajaran Mata Kuliah (CPMK)	CPMK1	Mahasiswa mampu menguraikan dan mengevaluasi penggunaan metode komputasi dalam menyelesaikan permasalahan struktur elektronik zat mampat				
	CPMK2	Mahasiswa mampu menguraikan dan membahas penyelesaian nilai eigen dengan metode Numerov, faktorisasi, diagonalisasi, self-consistent field, dan Hartree-Fock.				
	CPMK3	Mahasiswa mampu menguraikan dan membahas metode <i>Tight-Binding</i> dalam menyelesaikan permasalahan struktur elektronik zat mampat.				
	CPMK4	Mahasiswa mampu menguraikan dan membahas metode <i>first principle-density functional theory (DFT)</i> dalam menyelesaikan permasalahan struktur elektronik zat mampat.				
	CPMK5	Mahasiswa mampu menafsirkan dan mengkorelasikan antara data eksperimen (spektroskopi optik dan spektroskopi elektron) dan perhitungan komputasi untuk sistem banyak partikel misalkan untuk material 2D				
Pemetaan CPL dengan CPMK		CPMK 1	CPMK 2	CPMK 3	CPMK 4	CPMK 5
	CPU1	√	√	√	√	√
	CPU2		√	√	√	√
	CPU3		√	√	√	√
	CPP2	√	√	√	√	√
Deskripsi Singkat Mata Kuliah	<p>Mata kuliah Komputasi Struktur Elektronik Zat Mampat adalah matakuliah pilihan program studi S2 Ilmu Fisika di Universitas Gadjah Mada. Matakuliah ini diberikan di semester genap. Penyediaan matakuliah ini dimaksudkan untuk memberikan pengetahuan menengah sampai ke level lanjut mengenai sistem perkembangan terkini mengenai nanosains dan nanoteknologi yang mendasari kemajuan di bidang sains dan teknologi dengan pendekatan komputasi. Mata kuliah ini terkait erat dengan dua kecabangan utama di dalam ilmu Fisika yaitu pengetahuan teori dan komputasi. Sebagaimana diketahui fisikawan menggambarkan dan meneliti alam melalui pendekatan Eksperimen, Teori Analitik dan metode Komputasi. Dari segi objek kajian, mata kuliah terkait dengan bidang kajian Fisika Zat Mampat terutama pada aspek struktur elektronik, yang secara fundamental merupakan solusi dari penyelesaian persamaan Schrodinger untuk sistem banyak partikel (untuk tinjauan material zat mampat).</p> <p>Tujuan pembelajaran matakuliah ini dapat dilihat dari capaian pembelajaran yang diinginkan yaitu agar:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Mahasiswa mampu menguraikan dan mengevaluasi penggunaan metode komputasi dalam menyelesaikan permasalahan struktur elektronik zat mampat 2. Mahasiswa mampu menguraikan dan membahas penyelesaian nilai eigen dengan metode Numerov, faktorisasi, diagonalisasi, self-consistent field, dan Hartree-Fock. 3. Mahasiswa mampu menguraikan dan membahas metode <i>Tight-Binding</i> dalam menyelesaikan 					

	<p>permasalahan struktur elektronik zat mampat.</p> <ol style="list-style-type: none"> 4. Mahasiswa mampu menguraikan dan membahas metode <i>first principle-density functional theory (DFT)</i> dalam menyelesaikan permasalahan struktur elektronik zat mampat. 5. Mahasiswa mampu menafsirkan dan mengkorelasikan antara data eksperimen (spektroskopi optik dan spektroskopi elektron) dan perhitungan komputasi untuk sistem banyak partikel misalkan untuk material 2D . <p>Adapun metode pembelajaran yang digunakan dalam kuliah ini adalah:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ceramah tatap muka (CTM): Dosen memberikan materinya secara runut dan menjabarkan detail-detail penjelasan yang dianggap perlu. Pada ceramah tatap muka ini disertai dengan sesi tanya jawab. 2. Diskusi (D): Mahasiswa (dalam satu kelas) yang sudah dibagi menurut kelompok, mendiskusikan suatu permasalahan yang diberikan dalam tugas kelas, kemudian mendiskusikan dalam forum kelas dengan kelompok lain. 3. Kuliah daring meliputi metode <i>synchronous</i> menggunakan media google meet dan metode <i>asynchronous</i> berupa video penjelasan materi tertentu yang diunggah di laman mata kuliah <i>google classroom</i>. <p>Untuk mengetahui hasil pembelajaran dilakukan evaluasi melalui komponen-komponen berikut:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Tugas Rumah : 20 % 2. Ujian Tengah Semester (UTS) : 40 % 3. Ujian Akhir Semester (UAS) : 40% <p>Tugas rumah diberikan sebanyak dua kali mengenai aspek pemrograman dan penyelesaian kasus sederhana perhinggungan struktur elektronik material dua dimensi. Ujian tengah semester dan ujian akhir semester berupa <i>project</i> menyelesaikan permasalahan dalam struktur elektronik dari suatu material yang harus diselesaikan dalam kurun waktu 2 minggu.</p>
<p>Bahan Kajian/Materi Pembelajaran</p>	<p>Materi pembelajaran meliputi:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. PENDAHULUAN: peranan komputasi dalam mnejelaskan permasalahan fundamental maupun terapan pada struktur elektronik zat mampat (<i>density of states, band structure</i>) 2. RANGKUMAN METODE NUMERIK : Turunan numerik (Metode <i>finite difference</i>), integrasi numerik (trapezium dan Simpson1/3) 3. PERSAMAAN SCHRODINGER TAK GAYUT WAKTU: Solusi numerik meggunakan metode Numerov orde kedua 4. PERSAMAAN SCHRODINGER TAK GAYUT WAKTU: Solusi numerik meggunakan metode diagonalisasi matrik (<i>similarity transformation, Householder transformation, Jacobi rotation</i>) 5. DIAGRAM TINGKAT TENAGA UNTUK PARTIKEL PADA POTENSIAL PERIODIK: Teorema Bloch, metode numerik untuk menyelesaikan persamaan central. Zone Brillouin. Aplkasi metode diagonalisasi dalam memperoleh band structure sistem 1D. 6. METODE TIGHT-BINDING: Metode numerik untuk menyelesaikn band structure menggunakan metode <i>tight – binding</i> , integral transfer, integral overlap, orbital overlap. Aplikasi metode numerik metode diagonalisasi untuk menyelesaikan model <i>tight-binding</i>. 7. HANDS-ON PROGRAMMING MENGGUNAKAN IGOR PRO: <i>plotting data</i>, membuat macro dan program dalam IGOR untuk menyelesaikan perhitungan <i>band structure</i>. 8. PENGANTAR PENDEKATAN BORN–OPPENHEIMER DAN HARTREE-FOCK: Pendekatan Born-Oppenheimer, prinsip variasi, pendekatan Hartree-Fock. 9. Pengenalan DENSITY-FUNCTIONAL THEORY (DFT): Persamaan Schrodinger untuk masalah banyak benda, teorema Hohenberg-Kohn 10. DENSITY-FUNCTIONAL THEORY: Teorema Hohenberg-Kohn, Self-Consistent Kohn-persamaan Kohn-Sham, 11. EXCHANGE AND CORRELATION FUNCTIONAL: Local density approximation (LDA), Generalized gradient approximation (GGA) . 12. BASIS SET FUNGSI GELOMBANG DAN PSEUDOPOTENTIAL: Plane wave dan linear combination of atomic orbitals, norm-conserving dan ultrasoft pseudopotential

	<p>13. KOMPUTASI DENSITY FUNCTIONAL THEORY: self-consisten field untuk optimasi geometri, density of states, band structure</p> <p>14. APLIKASI DENSITY FUNCTIONAL THEORY: Optimasi konstanta kisi, perhitungan sistem supercell, sistem molekul</p>						
Metode Penilaian dan Kaitan dengan CPMK	Komponen Penilaian	Persentase	CPMK 1	CPMK 2	CPMK 3	CPMK 4	CPMK 5
	Penilaian formatif sebelum UTS berupa Tugas 1	10		√			
	Penilaian formatif setelah UTS berupa Tugas 2	10				√	
	Penilaian sumatif berupa Ujian Tengah Semester (UTS)	40	√		√		√
	Penilaian sumatif berupa Ujian Akhir Semester (UAS)	40	√			√	√
Daftar Bahan dan Referensi	<p>1. Richard Martins, 2004, Electronic Structure, Cambridge University Press</p> <p>2. J.M., Thijssen, 1999, Computational Physics, Cambridge University Press</p> <p>3. Tao Pang, An introduction to computational physics, Cambridge press (2006)</p> <p>4. Paolo Giannozzi, Numerical Method in Quantum Mechanics, Lecture notes</p> <p>5. Online course NanoHub: www.nanohub.org</p> <p>6. Sholl, David S., Density functional theory : a practical introduction, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey</p>						
Nama Dosen Pengampu (<i>Team Teaching</i>)	<p>1. Dr. Iman Santoso</p> <p>2. Dr. Sholihun</p>						
Otorisasi	Tanggal Penyusunan	Koordinator Mata Kuliah		Koordinator Bidang Keahlian		Ketua Program Studi	
	5 Januari 2021	Dr. Iman Santoso		Dr. Dwi Satya Palupi		Dr. Mirza Satriawan	

CAPAIAN PEMBELAJARAN LULUSAN PROGRAM STUDI MAGISTER (S2) FISIKA

Lulusan program studi S2 Fisika diharapkan memiliki capaian pembelajaran sebagai berikut:

A. Capaian Pembelajaran Utama (CPU):

1. Menguasai bidang dasar ilmu fisika yang meliputi kajian Elektrodinamika, Mekanika Klasik, dan Mekanika Kuantum (**CPU1**)
2. Menguasai dan mampu menerapkan salah satu bidang ilmu Fisika Lanjut (**CPU2**)
3. Menguasai kemampuan untuk mengkaji suatu permasalahan di dalam suatu bidang Fisika melalui penelitian (**CPU3**).

B. Capaian Pembelajaran Pendukung (CPP):

1. Menguasai berbagai disiplin matematika yang relevan dengan suatu bidang ilmu Fisika Lanjut (**CPP1**).
2. Menguasai berbagai kajian komputasi yang dapat digunakan untuk suatu bidang ilmu Fisika Lanjut (**CPP2**).

C. Capaian Pembelajaran Tambahan (CPT):

1. Mampu mengkomunikasikan secara lisan dan tertulis hasil-hasil penguasaannya atas berbagai bidang ilmu Fisika (**CPT1**).
2. Memiliki etika dan sikap profesionalitas yang terpuji sebagai seorang ilmuwan (**CPT2**).

Rencana Kegiatan Pembelajaran Mingguan (RKPM)

Minggu Ke-	Sub-CPMK (Kemampuan Akhir yang Direncanakan)	Metode Penilaian			Bahan Kajian (Materi Pembelajaran)	Metode Pembelajaran	Beban Waktu Pembelajaran	Pengalaman Belajar Mahasiswa	Media Pembelajaran	Pustaka dan Sumber Belajar Eksternal
		Indikator	Komponen	Bobot (%)						
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)	(11)
1	CPMK1	-	-	-	PENDAHULUAN : Penjelasan dan perjanjian perkuliahan. 1.1 Mengulas singkat mengenai nanosains dan nanoteknologi 1.2 Mengulas sekilas pengaruh komputasi pada struktur elektronik zat mampat 1.3. Metode komputasi turunan numerik (<i>finite difference</i>)	Pemaparan materi serta beberapa bahan tayangan	2 x 50 menit 1 x 50 menit	Belajar menelaah dan mengkaji metode komputasi pada sistem zat mampat	In-focus dan Papan Tulis, Video <i>synchronous</i> dan <i>asynchronous</i>	Pustaka 1, 2,3,4,5
2	CPMK2				2.1 Ringkasan metode komputasi: Integrasi Numerik (Metode Trapeium dan Simpson 1/3) 2.2. PERSAMAAN SCHRODINGER TAK GAYUT WAKTU: Solusi numerik menggunakan	Pemaparan materi serta beberapa bahan tayangan	2 x 50 menit 1 x 50 menit	Belajar menelaah dan mengkaji metode komputasi pada sistem zat mampat	In-focus dan Papan Tulis, Video <i>synchronous</i> dan <i>asynchronous</i>	Pustaka 1, 2,3,4,5

					metode Numerov					
3	CPMK2				3.1. PERSAMAAN SCHRODINGER TAK GAYUT WAKTU : Solusi numerik menggunakan metode Numerov 3.2 Pengenalan Pemrograman IGOR Pro	Pemaparan materi serta beberapa bahan tayangan	2 x 50 menit 1 x 50 menit	Belajar menelaah dan mengkaji metode komputasi pada sistem zat mampat. Hands on IGOR programming	In-focus dan Papan Tulis, Video <i>synchronous</i> dan <i>asynchronous</i>	Pustaka 1, 2,3,4,5
4	CPMK2	Penyelesaian Soal pada Tugas	Tugas 1	10	4.1 Pengenalan Pemrograman IGOR Pro 4.2 Penggunaan Pemrograman IGOR Pro untuk menyelesaikan Pers. Schrodinger tak gayut waktu menggunakan metode Numerov	Pemaparan materi serta beberapa bahan tayangan dengan tambahan pemberian Tugas	2 x 50 menit 1 x 50 menit	Belajar menelaah dan mengkaji metode komputasi pada sistem zat mampat. Hands on IGOR programming	In-focus dan Papan Tulis, Video <i>synchronous</i> dan <i>asynchronous</i>	Pustaka 1, 2,3,4,5
5	CPMK2				5.1. Metode Numerik Diagonalisasi Matrik : <i>Similarity transformation</i> , Householder, Rotasi Jacobi. 5.2. PERSAMAAN SCHRODINGER TAK GAYUT WAKTU : Solusi numerik	Pemaparan materi serta beberapa bahan tayangan	2 x 50 menit 1 x 50 m3nit	Belajar menelaah dan mengkaji metode komputasi pada sistem zat mampat. Hands on IGOR programming	In-focus dan Papan Tulis, Video <i>synchronous</i> dan <i>asynchronous</i>	Pustaka 1, 2,3,4,5

					meggunakan metode diagonalisasi matriks					
6	CPMK2, CPMK3	-	-	-	<p>6.1 DIAGRAM TINGKAT TENAGA UNTUK PARTIKEL PADA POTENSIAL PERIODIK: Teorema Bloch, metode numerik untuk menyelesaikan persamaan central. Zone Brillouin. Aplkasi metode diagonalisasi dalam memperoleh <i>band structure</i> sistem 1D</p> <p>6.2. METODE TIGHT-BINDING: Metode numerik untuk menyelesaikn band structure menggunakan metode <i>tight – binding</i> , integral transfer, integral overlap, orbital overlap. Aplikasi metode numerik metode</p>	Pemaparan materi serta beberapa bahan tayangan dengan tambahan pemberian Tugas	2 x 50 menit 1 x 50 m3nit	Belajar menelaah dan mengkaji metode komputasi pada sistem zat mampat. Hands on IGOR programming	In-focus dan Papan Tulis, Video <i>synchronous</i> dan <i>asynchronous</i>	Pustaka 1, 2,3,4,5

					diagonalisasi untuk menyelesaikan model <i>tight-binding</i>					
7	CPMK3 dan CPMK5				7. 1.METODE TIGHT-BINDING: Metode numerik untuk menyelesaikan band structure menggunakan metode <i>tight – binding</i> , integral transfer, integral overlap, orbital overlap. Aplikasi metode numerik metode diagonalisasi untuk menyelesaikan model <i>tight-binding</i> 7.2. Brillouin Zone Sampling di ruang momentum	Pemaparan materi serta beberapa bahan tayangan	2 x 50 menit 1 x 50 m3nit	Belajar menelaah dan mengkaji metode komputasi pada sistem zat mampat. Hands on IGOR programming	In-focus dan Papan Tulis, Video <i>synchronous</i> dan <i>asynchronous</i>	Pustaka 1, 2,3,4,5
8	Evaluasi pemahaman mahasiswa secara menyeluruh.: CPMK 1, CPMK 2, CPMK 3, CPMK 5	-	-	-	Ujian Tengah Semester (UTS)	-	-	-	-	-
9	Evaluasi pemahaman mahasiswa secara menyeluruh.: CPMK 1, CPMK 2, CPMK 3, CPMK 5	Penyelesaian Soal.	UTS	40	Ujian Tengah Semester (UTS)	-Soal diberikan ke mhs melalui <i>google classroom</i>	2 Minggu	-	-	-
10	CPMK 1, CPMK 2, CPMK 4				PENGANTAR PENDEKATAN BORN-	Pemaparan materi serta beberapa	2 x 50 menit 1 x 50 m3nit	Belajar menelaah dan mengkaji	In-focus dan Papan Tulis,	Pustaka 1, 2,3,4,5

					OPPENHEIMER DAN HARTREE-FOCK: Pendekatan Born-Oppenheimer, prinsip variasi, pendekatan Hartree-Fock.	bahan tayangan		metode komputasi pada sistem zat mampat. Hands on IGOR programming	Video <i>synchronous</i> dan <i>asynchronous</i>	
11	CPMK 1, CPMK 2, CPMK 4, CPMK 5				PENGENALAN DENSITY-FUNCTIONAL THEORY (DFT): Persamaan Schrodinger untuk masalah banyak benda, teorema Hohenberg-Kohn	Pemaparan materi serta beberapa bahan tayangan	2 x 50 menit 1 x 50 menit	Belajar menelaah dan mengkaji metode komputasi pada sistem zat mampat	In-focus dan Papan Tulis, Video <i>synchronous</i> dan <i>asynchronous</i>	Pustaka 1, 2,3,4,5,6
12	CPMK 1, CPMK 2, CPMK 4, CPMK 5				DENSITY-FUNCTIONAL THEORY: Teorema Hohenberg-Kohn, Self-Consistent Kohn- persamaan Kohn-Sham,	Pemaparan materi serta beberapa bahan tayangan	2 x 50 menit 1 x 50 menit	Belajar menelaah dan mengkaji metode komputasi pada sistem zat mampat	In-focus dan Papan Tulis, Video <i>synchronous</i> dan <i>asynchronous</i>	Pustaka 1, 2,3,4,5,6
13	CPMK 1, CPMK 2, CPMK 4, CPMK 5				EXCHANGE AND CORRELATION FUNCTIONAL: Local density approximation (LDA), Generalized	Pemaparan materi serta beberapa bahan tayangan	2 x 50 menit 1 x 50 menit	Belajar menelaah dan mengkaji metode komputasi pada sistem zat mampat	In-focus dan Papan Tulis, Video <i>synchronous</i> dan <i>asynchronous</i>	Pustaka 1, 2,3,4,5,6

					gradient approximation (GGA) .					
14	CPMK 1, CPMK 2, CPMK 4, CPMK 5				BASIS SET FUNGSI GELOMBANG DAN PSEUDOPOTENTIAL: Plane wave dan linear combination of atomic orbitals, norm-conserving dan ultrasoft pseudopotential	Pemaparan materi serta beberapa bahan tayangan	2 x 50 menit 1 x 50 menit	Belajar menelaah dan mengkaji metode komputasi pada sistem zat mampat	In-focus dan Papan Tulis, Video <i>synchronous</i> dan <i>asynchronous</i>	Pustaka 1, 2,3,4,5,6
15	CPMK 1, CPMK 2, CPMK 4, CPMK 5				KOMPUTASI DENSITY FUNCTIONAL THEORY: self-consisten field untuk optimasi geometri, density of states, band structure	Pemaparan materi serta beberapa bahan tayangan	2 x 50 menit 1 x 50 menit	Belajar menelaah dan mengkaji metode komputasi pada sistem zat mampat	In-focus dan Papan Tulis, Video <i>synchronous</i> dan <i>asynchronous</i>	Pustaka 1, 2,3,4,5,6
16	CPMK 1, CPMK 2, CPMK 3, CPMK 4, CPMK 5				APLIKASI DENSITY FUNCTIONAL THEORY: Optimasi konstanta kisi, perhitungan sistem supercell, sistem molekul	Pemaparan materi serta beberapa bahan tayangan	2 x 50 menit 1 x 50 menit	Belajar menelaah dan mengkaji metode komputasi pada sistem zat mampat	In-focus dan Papan Tulis, Video <i>synchronous</i> dan <i>asynchronous</i>	Pustaka 1, 2,3,4,5,6

17	Evaluasi pemahaman mahasiswa secara menyeluruh.: CPMK 1, CPMK 2, CPMK 3, CPMK 4, CPMK 5	-	UAS	-	Ujian Akhir Semester (UAS)	-	-	-	-	-
18	Evaluasi pemahaman mahasiswa secara menyeluruh.: CPMK 1, CPMK 2, CPMK 3, CPMK 4, CPMK	Penyelesaian Soal.	UAS	40	Ujian Akhir Semester (UAS)	-Soal diberikan ke mhs melalui <i>google classroom</i>	-	-	-	-

