

**PENGARUH ENKAPSULASI Be TERHADAP KARAKTERISASI SILICON  
NANOTUBE ARMCHAIR**

**ENCAPSULATION EFFECT OF Be ON THE SILICON NANOTUBES ARMCHAIR  
CHARACTERIZATION**

*Cindy Putri Arinta\* dan I Gusti Made Sanjaya*

*Department of Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences  
State University of Surabaya*

Jl. Ketintang, Surabaya, (60231), tlp 031-8298761

\*corresponding author: cputriarinta@gmail.com

**Abstrak.** Telah dilakukan kaji teoritis untuk mengetahui pengaruh enkapsulasi Be terhadap karakterisasi silicon nanotube armchair (SiNT<sub>(17,17)-(20,20)</sub>). Penelitian ini menggunakan metode Teori Fungsi Kerapatan (DFT) dengan pendekatan LDA serta basis set yang digunakan adalah DZVP dan TZV2P. Semakin besar nilai kiralitas dari struktur SiNT, semakin besar pula diameter yang dihasilkan, sehingga berakibat pada nilai celah energinya dimana diameter yang lebih besar akan menghasilkan nilai celah energi nanotube yang lebih kecil, seperti halnya pada carbon nanotube. Dengan adanya enkapsulasi Be, nilai celah energi SiNT armchair menjadi semakin menurun. Celah energi SiNT-Be<sub>(17,17)-(20,20)</sub> berturut-turut adalah 1,667211; 1,560685; 1,560084; 1,504471. Selain itu, enkapsulasi Be juga mempengaruhi kestabilan struktur SiNT armchair yang ditandai dengan semakin rendahnya energi. Energi total dari optimasi geometri SiNT-Be<sub>(17,17)-(20,20)</sub> berturut-turut adalah -80,78410753; -62,99276708; -51,48317972; -48,69537121. Tipe semikonduktor yang dihasilkan dari pengenkapsulasian Be ini menghasilkan semikonduktor dengan tipe-p.

**Kata kunci :** silicon nanotube, DFT, celah energi

**Abstract.** Theoretical studies has been done to determine the encapsulation effect of Be on the silicon nanotubes armchair (SiNT<sub>(17,17)-(20,20)</sub>). Experimental methods used Density Function Theory (DFT) with LDA approach and basis set used is DZVP and TZV2P. The greater value of the chirality of SiNT structure, the greater diameter is produced, resulting in the value of band gap where a larger diameter will produce smaller band gap of nanotubes, as well as on carbon nanotubes. With the encapsulation of Be, the band gap of SiNT armchair be decreased. Band gap SiNT-Be<sub>(17,17)-(20,20)</sub> respectively is 1.667211; 1.560685; 1.560084; 1.504471. In addition, encapsulation of Be tagged affect the stability of SiNT armchair with the lower energy. The total energy of the geometry optimization SiNT-Be<sub>(17,17)-(20,20)</sub> respectively -80.78410753; -62.99276708; -51.48317972; -48.69537121. The resulting semiconductor types of encapsulation Be is a p-type semiconductor.

**Key words :** silicon nanotube, DFT, band gap

## PENDAHULUAN

Dewasa ini telah banyak dilakukan penelitian tentang nanomaterial sebagai aplikasi dalam bidang elektronik. Salah satunya adalah *silicon nanotube*. *Silicon nanotube* (SiNT) merupakan suatu komposisi senyawa silikon yang membentuk tabung berukuran nano. SiNT memiliki 3 bentuk *nanotube* yang berbeda, tergantung dari kiralitasnya, yakni *armchair* (n,m dengan n=m), *zigzag* (n,0), dan *chiral* (n,m dengan n≠m). Sifat yang dimiliki molekul silinder

silikon ini cukup unik dan memiliki banyak manfaat dibidang elektronik, nanoteknologi, optik, teknologi material dan bidang ilmu lain. Dalam terapan Kimia Kuantum, sifat kekuatan yang dimiliki *silicon nanotube* sangat unik, karena ikatan kimia dari *silicon nanotube* terbentuk dari ikatan  $sp^2$  yang mirip dengan grafit, dimana ikatan ini lebih kuat dibandingkan dengan ikatan  $sp^3$  yang ditemukan pada alkana.

Di era modern ini perangkat elektronik sudah menjadi bagian penting dari masyarakat

yang berakibat permintaan menjadi semakin meningkat, sehingga menumbuhkan minat dalam pengembangan perangkat nano yang bisa memungkinkan fungsi baru dan meningkatkan kinerja. Kawat nano semikonduktor muncul sebagai bahan yang menarik, melalui perkembangan yang terus dilakukan, membuka peluang besar untuk perangkat fotonik dan elektronik dalam skala nano. Silikon murni memiliki konduktivitas yang terlalu rendah untuk digunakan pada komponen elektronik. Pada prakteknya, silikon murni disisipi dengan elemen lain sehingga meningkatkan konduktivitasnya. Struktur geometris dari SiNT juga dapat distabilkan dengan adanya sisipan logam (enkapsulasi).

Enkapsulasi logam sangat penting untuk digunakan dalam pengontrolan struktur SiNT agar strukturnya lebih stabil dan juga merupakan salah satu cara untuk mengubah nilai celah energi SiNT. Pada struktur SiNT (10,0) bersifat kurang stabil. Agar SiNT (10,0) lebih stabil, maka perlu disisipkan suatu logam didalamnya [1]. Penelitian juga dilakukan untuk melihat kestabilan struktur SiNT dengan mengenkapsulasi logam Ni, dan didapatkan struktur SiNT yang lebih stabil [2]. Dipelajari juga tiga struktur dari *finite* SiNT pada B3LYP/6 - 31G bahwa struktur silikon *armchair* lebih stabil dibandingkan struktur *zigzag* [3].

Dalam penelitian ini, SiNT yang berbentuk *armchair* dengan kiralitas mulai dari (17,17) hingga (20,20) akan mengenkapsulasi logam Be yang akan diteliti pengaruhnya terhadap celah energi dan tipe semikonduktor yang dihasilkan dengan metode DFT. Dipilih bentuk *armchair* karena sifat dari SiNT yang berbentuk *armchair* ini adalah semikonduktor mendekati metalik, sehingga celah energinya relatif lebih kecil dibandingkan dengan bentuk *zigzag* dan *chiral*. Logam Be dipilih karena seperti yang telah diketahui bahwa logam alkali tanah memiliki konduksi termal dan listrik yang baik dan jarang memiliki aplikasi yang penting, serta *nanotube* yang tersisipi logam ini kurang untuk didiskusikan bahkan pada *Carbon Nanotube* (CNTs).

Metode kimia komputasi sangat berpengaruh terhadap keakuratan hasil perhitungan. Dalam hal ini, metode yang digunakan adalah Teori Fungsional Kerapatan (DFT), karena struktur dimodelkan dengan

akurat dan data yang dihasilkan dalam tingkat mikroskopik berkorelasi signifikan dengan data hasil eksperimen laboratorium, dengan proses komputasi yang lebih ringan dan nilai parameter sifat fisika-kimia yang dihasilkan sangat akurat. Dalam DFT, total energi dinyatakan dalam istilah kerapatan elektron total, bukan sebagai fungsi gelombang. Metode DFT dipakai untuk melakukan optimasi struktur sampel, pengukuran energi, serta celah energi. Metode ini sudah digunakan secara luas dalam kalkulasi teoritis terkait penelitian bersampel *nanotube*, termasuk di dalamnya studi mengenai bentuk geometri struktur maupun sifat elektroniknya [4].

## METODE PENELITIAN

### Perangkat Keras dan Lunak

Proses komputasi dilakukan menggunakan komputer dengan spesifikasi prosesor Intel(R) Core™ i3-4010U CPU @1.70GHz x 4, RAM 3.7 GiB dan *OS type* 64-bit, sistem operasi Ubuntu 14.04 LTS. *Software* GDIS 9.0 digunakan untuk membuat pemodelan struktur SiNT. Avogadro 1.0.1 digunakan untuk melakukan optimasi pra metode. Gedit digunakan untuk menyusun *input file*, CP2K 2.4.0 digunakan untuk melakukan semua perhitungan komputasi struktur SiNT, dan Virtual NanoLab 2015.1 digunakan untuk menampilkan *band structure*.

### Prosedur penelitian

#### Pembuatan Model Awal

Langkah pertama adalah memodelkan struktur SiNT yang mengenkapsulasi dan yang tidak mengenkapsulasi logam Be dengan bentuk 3 dimensi dengan menggunakan *software* GDIS 9.0 kemudian di optimasi secara sederhana menggunakan *software* Avogadro 1.0.1 selanjutnya struktur yang telah dibuat tersebut disimpan dengan file berekstensi .xyz untuk digunakan selanjutnya dalam penyusunan *file input* melalui program gedit.

#### Optimasi geometri

Optimasi geometri dilakukan menggunakan *Software* CP2K 2.4.0 dengan metode DFT/LDA, *basis set* DZVP dan TZV2P serta parameter-parameter lainnya yang telah disusun dalam *file input*-an. *File*

*input* ini kemudian dijalankan di terminal untuk memulai proses perhitungan.

### Penentuan Celah Energi dan total energi

Penghitungan celah energi dilakukan untuk struktur SiNT dan SiNT-Be. Nilai celah energi serta total energi bisa dianalisis dari *file output* hasil optimasi geometri menggunakan *software* CP2K 2.4.0.

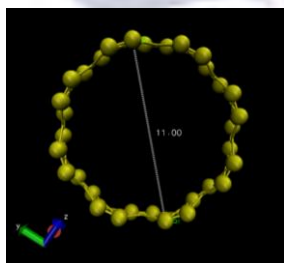
### Penggambaran *band structure*

Langkah yang terakhir ialah mengetahui *band structure* dari struktur SiNT dan SiNT-Be dengan menggunakan program Virtual NanoLab 2015.1. Program ini mulai melakukan perhitungan sampai diperoleh *band structure* dari struktur SiNT dan SiNT-Be.

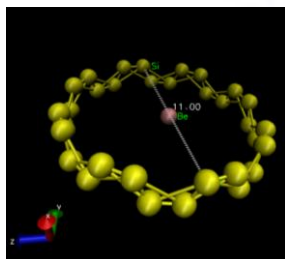
## HASIL DAN PEMBAHASAN

### Hasil *Modelling* SiNT *armchair* dan SiNT *armchair* yang Mengenkapsulasi logam Be

Proses *modelling* dilakukan untuk struktur SiNT yang mengenkapsulasi dan yang tidak mengenkapsulasi logam Be dengan kiralitas mulai (17,17) - (20,20). Sebagai contoh struktur SiNT *armchair* sebelum mengenkapsulasi logam Be dan sesudah mengenkapsulasi logam Be adalah sebagai berikut:



Gambar 1. Hasil *modelling* SiNT



Gambar 2. Hasil *modelling* SiNT-Be

Berdasarkan hasil pemodelan SiNT *armchair* dapat diketahui pula panjang diameternya, seperti yang ditampilkan pada tabel berikut:

Tabel 1. Diameter SiNT *armchair*

Kiralitas SiNT	Diameter (nm)
(17,17)	2,34099
(18,18)	2,47518
(19,19)	2,60376
(20,20)	2,75020

Berdasarkan grafik diatas, semakin besar angka kiralitas yang membentuk SiNT, semakin besar diameternya, dikarenakan setiap penambahan angka kiralitas, ada penambahan 4 atom Si, hal inilah yang menyebabkan diameter dari SiNT semakin membesar. Selain dilakukan pemodelan, dilakukan juga optimasi terhadap SiNT yang mengenkapsulasi dan tidak mengenkapsulasi logam Be untuk memperoleh struktur paling stabil dengan tingkat energi minimum, karena pemodelan awal yang terbentuk bukan merupakan suatu pemodelan dengan konformasi yang paling stabil. Oleh karena itu dilakukan optimasi geometri yang bertujuan untuk membentuk pemodelan yang kestabilannya mendekati senyawa asli.

Proses komputasi dilakukan dengan tujuan untuk mengoptimasi fungsi gelombang sehingga diperoleh energi yang lebih minimum daripada optimasi geometri. Proses komputasi dilakukan dengan metode DFT dengan pendekatan LDA. Hal ini memberikan hasil yang cukup baik apabila dibandingkan dengan hasil eksperimen pada daya komputasi yang relatif rendah, ketika dibandingkan dengan cara - cara penyelesaian masalah mekanika kuantum banyak-partikel yang lain [5].

Basis set yang digunakan yakni TZV2P (*Triple Zeta Valence 2 Polarization*) untuk atom Si dan DZVP (*Double Zeta Valence Polarization*) untuk atom logam yang dienkapsulasikan (Be). Berdasarkan literatur yang ada basis set ini telah sukses digunakan untuk memodelkan *nanotube* yang mengenkapsulasi logam [6].

### Hasil Penelitian Celah Energi SiNT *Armchair* yang mengenkapsulasi logam Be

Celah energi merupakan selisih antara energi terendah pada pita konduksi dengan energi tertinggi pada pita valensi. Nilai celah energi dapat menentukan kemudahan eksitasi elektron. Berikut adalah nilai celah energi dari SiNT *Armchair* yang mengenkapsulasi logam.

**Tabel 2.** Celah energi SiNT *Armchair* yang mengenkapsulasi logam Be

Kiralitas SiNT	Celah Energi (eV)	
	SiNT	SiNT-Be
17,17	1,717004	1,667211
18,18	1,680908	1,560685
19,19	1,629822	1,560084
20,20	1,535048	1,504471

Berdasarkan data dari tabel 2, terjadi penurunan nilai celah energi dari struktur SiNT<sub>(17,17)</sub> ke struktur SiNT<sub>(20,20)</sub> dan hal tersebut tidak hanya terjadi pada struktur SiNT *armchair* dasar saja melainkan juga pada struktur SiNT *armchair* yang mengenkapsulasi logam Be. Semakin besar nilai kiralitas dari struktur SiNT *armchair* maka diameter yang dihasilkan juga semakin besar (tabel 1), dimana diameter yang lebih besar akan memberikan hasil nilai celah energi *nanotube* yang lebih kecil seperti halnya pada *carbon nanotube* yang celah energinya dipengaruhi oleh diameter dan hubungan keduanya dapat dirumuskan melalui persamaan:  $E_{gap} = \frac{2y_0 a_{cc}}{d}$  dengan  $y_0$  adalah energi ikat antar atom C,  $a_{cc}$  adalah jarak terdekat antar atom C, dan  $d$  adalah diameter, sehingga apabila nilai penyebut (diameter) lebih besar dari nilai pembilang maka nilai akhir ( $E_g$ ) yang dihasilkan semakin kecil [7].

Penurunan nilai celah energi pada struktur SiNT *armchair* yang mengenkapsulasi logam Be dipengaruhi oleh energi ionisasi yang dimiliki atom logam Be. Logam Be memiliki energi ionisasi kecil akan mudah melepaskan elektron. Jika logam semakin mudah melepaskan elektron, maka sifat konduktivitasnya (semikonduktor dan konduktor) akan bertambah. Ini berarti dengan bertambahnya konduktivitas, celah energi yang dihasilkan semakin kecil, sehingga benar bahwa dengan adanya enkapsulasi Be dapat menurunkan celah energi.

### Hasil Penelitian Total Energi Silicon Nanotube *Armchair* yang mengenkapsulasi logam Be

Total energi ini merupakan hasil akhir dari optimasi fungsi gelombang yang dapat digunakan untuk menentukan kestabilan suatu struktur. Berikut adalah nilai total energi hasil

komputasi dari SiNT *Armchair* yang mengenkapsulasi logam Be:

**Tabel 3.** Total Energi Hasil Komputasi SiNT *Armchair* yang mengenkapsulasi logam Be

Kiralitas SiNT	Total Energi (eV)	
	SiNT	SiNT-Be
17,17	-61,42804532	-80,78410753
18,18	-49,84989815	-62,99276708
19,19	-34,43730172	-51,48317972
20,20	-31,58660542	-48,69537121

Berdasarkan data dari hasil perhitungan total energi seperti pada tabel 3, secara keseluruhan total energi dari struktur SiNT *armchair* (17,17) ke (20,20) (dari atas ke bawah) baik yang mengenkapsulasi logam maupun yang tidak mengenkapsulasi logam Be memiliki energi yang semakin besar dan total energi struktur SiNT *armchair* yang mengenkapsulasi logam memiliki energi yang lebih rendah dibandingkan dengan struktur SiNT *armchair* yang tidak mengenkapsulasi logam. Ini berarti dengan adanya enkapsulasi logam, SiNT *armchair* menambah gaya ikat untuk membentuk konformasi struktur yang lebih kuat dan stabil. Kestabilan dari struktur SiNT *armchair* yang mengenkapsulasi logam ini berasal dari adanya interaksi antara atom Si dengan atom logam, dimana terbentuknya ikatan lemah antar molekul yang disebut dengan ikatan *van der waals*. Gaya *van der waals* merupakan gaya antar molekul khas untuk molekul nonpolar yang terjadi karena distribusi muatan yang sesaat tidak seragam (dipol sesaat) yang disebabkan fluktuasi awan elektron di sekitar inti. Dalam kondisi yang sama, semakin banyak jumlah elektron dalam molekul semakin mudah molekul tersebut akan dipolarisasi sebab elektron-elektronnya akan tersebar luas. Apabila dua awan electron saling mendekati satu sama lain, dipol akan terinduksi ketika awan elektron mempolarisasi sedemikian sehingga menstabilkan yang bermuatan berlawanan.

### Hasil Visualisasi Band Structure SiNT *Armchair* yang mengenkapsulasi logam Be

Pita energi adalah kumpulan garis pada tingkat energi yang sama yang saling berimpit dan membentuk pita [8]. Tingkat- tingkat energi digambarkan dengan cara yang sama dengan atom tunggal. Interaksi antar atom pada kristal hanya terjadi pada elektron bagian

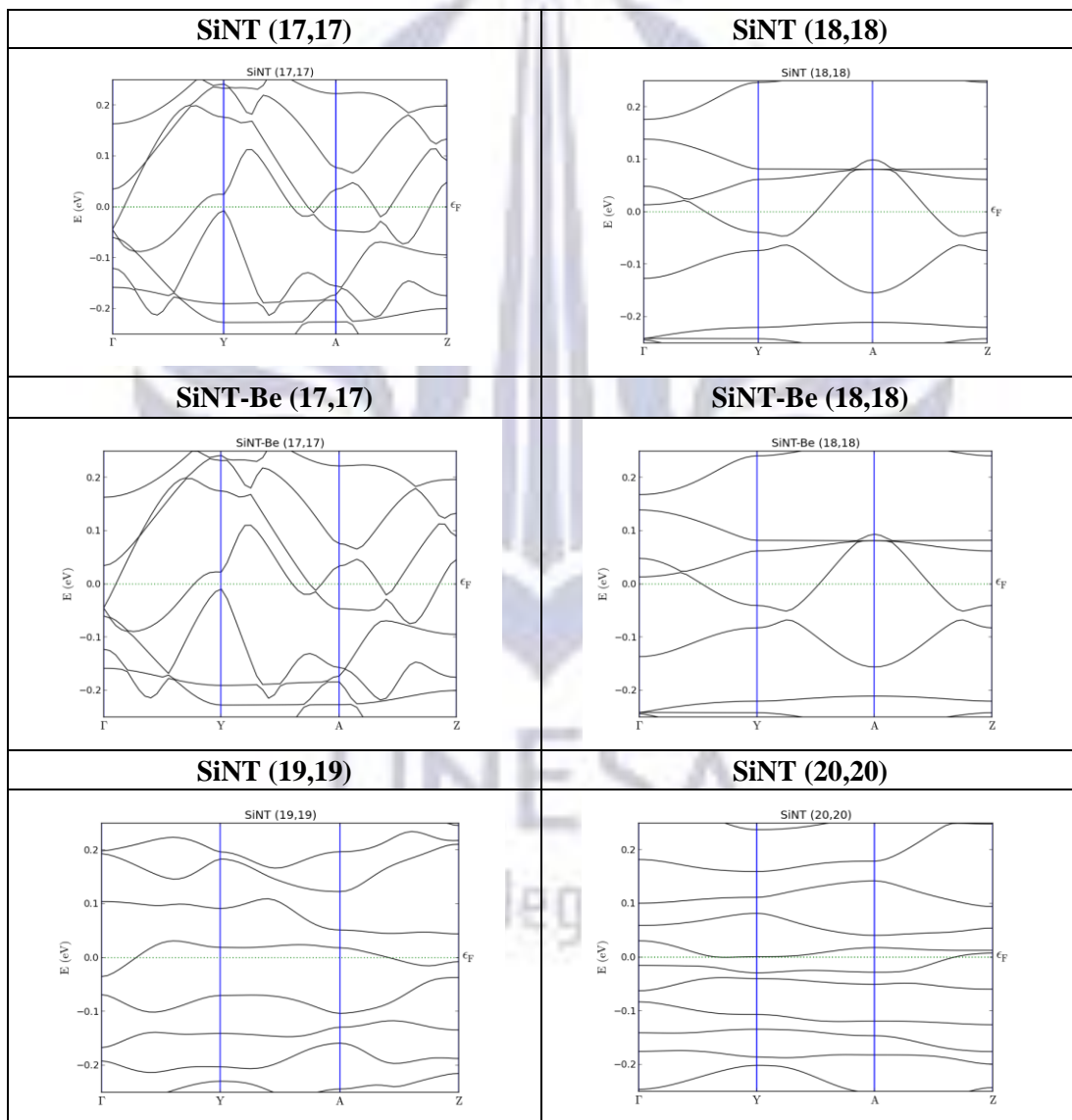
luar sehingga tingkat energi elektron pada orbit bagian dalam tidak berubah. Pada orbit bagian luar terdapat elektron yang sangat banyak dengan tingkat – tingkat energi yang berimpit satu sama lain. Berdasarkan asas Pauli, dalam satu tingkat energi tidak boleh terdapat lebih dari satu elektron pada keadaan yang sama.

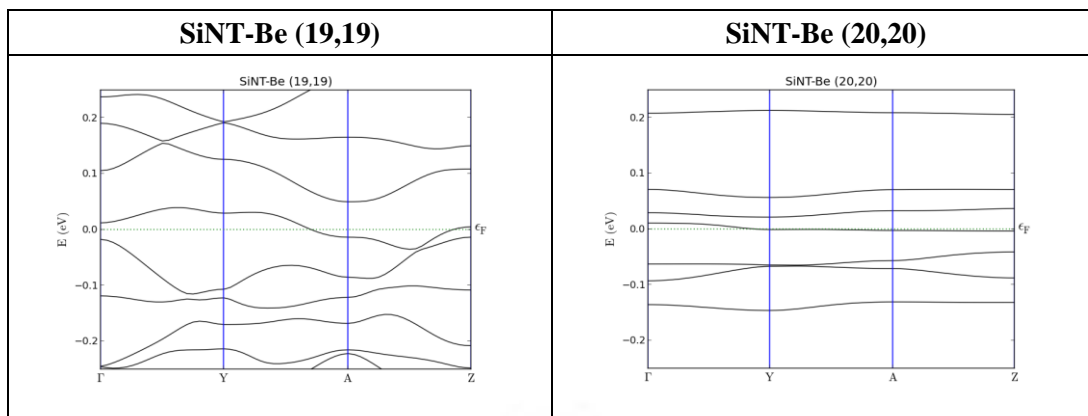
Energi fermi adalah tingkat energi tertinggi yang ditempati elektron pada suhu  $T = 0\text{ K}$  (pada keadaan dasar). Apabila suhu  $T >$

$0\text{ K}$ , maka elektron akan mampu bertransisi (loncat) ke tingkat energi yang lebih tinggi sedangkan elektron yang lainnya, pada waktu yang bersamaan, tidak dapat bertransisi ke tingkat energi yang lebih tinggi, hal ini terjadi dikarenakan berlakunya prinsip Pauli.

Berikut adalah hasil visualisasi *band structure* SiNT *armchair* yang mengenkapsulasi logam Be:

**Tabel 4.** *Band Structure Silicon Nanotube (SiNT) Armchair* yang mengenkapsulasi logam Be





Berdasarkan tabel diatas, dapat diprediksi tipe semikonduktor yang dihasilkan dari pengenkapsulasian logam Be. Tipe semikonduktor dapat dilihat dari kedekatan antara energi fermi/ $E_f$  (yang ditunjukkan dengan garis putus-putus) dengan garis-garis bergelombang yang melintang secara horizontal (menunjukkan orbital) yang berada pada titik – titik dalam *Brillouin zone* (Gamma, Y, A, Z). Dalam hal ini, sesuai dengan *band structure* yang dihasilkan dari komputasi SiNT *armchair*, dapat dilihat kedekatan  $E_f$  dengan orbital-orbital (HOMO/LUMO) yang berada pada titik gamma, sehingga bisa diprediksi tipe semikonduktor yang dihasilkan. Secara sederhana perhitungan komputasi di titik M, K, X dan gamma dalam *Brilouin zone* dapat menghasilkan celah energi. Hal ini dikarenakan terkadang energi maksimum dan minimum dari sembarang celah energi jatuh pada titik-titik tersebut, harga energi ini akan semakin kecil seiring dengan semakin besarnya sistem [9].

Energi fermi dari SiNT *armchair* yang mengenkapsulasi logam Be cenderung mendekati HOMO (pita valensi), sehingga dapat dikatakan bahwa SiNT *armchair* yang mengenkapsulasi logam Be memiliki sifat semikonduktor tipe-p. Hal ini terjadi dikarenakan adanya tingkat energi akseptor yang berasal dari atom Be sehingga dihasilkan *hole* (lubang) tanpa elektron bebas yang berakibat pada kelebihan *hole*. Kelebihan *hole* akan menempati tingkat energi sedikit diatas pita valensi sehingga apabila di tambah energi, elektron akan mudah berpindah dari pita valensi ke *hole* diatasnya, meninggalkan *hole* di pita valensi,

sehingga berkontribusi pada konduktivitas listrik.

## SIMPULAN DAN SARAN

### Simpulan

Semakin besar nilai kiralitas dari struktur SiNT, semakin besar pula diameter yang dihasilkan, sehingga berakibat pada nilai celah energinya dimana diameter yang lebih besar akan menghasilkan nilai celah energi *nanotube* yang lebih kecil. Dengan adanya enkapsulasi logam Be pada struktur SiNT *armchair*, dapat menurunkan nilai celah energi serta lebih menstabilkan struktur yang ditandai dengan semakin rendahnya energi. Tipe semikonduktor yang dihasilkan dari pengenkapsulasian logam Be adalah semikonduktor tipe-p.

### Saran

Perlu dipelajari kembali *silicon nanotube* dengan program komputasi lain yang lebih tinggi, sehingga dapat dihasilkan prediksi yang lebih akurat.

### DAFTAR PUSTAKA

1. Singh, A.K., Tina, M.B., Kumar, V. & Kawazoe, Y. 2003. Magnetismin Transition - Metal - Doped Silicon Nanotubes. *The American Physical Society*, 146802: 1-4.
2. Menon, M., Andriotis, A.N. & Froudakis, G. 2002. Structure and Stability of Ni-Encapsulated Si Nanotube. *Nano Letters*, Vol. 2, No.4: 301-304.
3. Pradhan, P. & Ray, A.K. 2005. A Hybrid Density Functional Study of Armchair Si and Ge Nanotubes. arXiv:physics, 0507205: 1-23.
4. Andriana, dkk. 2013. Pengaruh Enkapsulasi Logam Ga dan As terhadap

- Celah Pita Boron Nitride Nanotube (4,4). *Indonesian Journal of Chemical Science*, 2 (1) (2013).
5. Young, David C. 2001. *Computational Chemistry: Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*. New York: Wiley Interscience.
  6. Ling, Sanliang. 2015. *Optimization of Basis Set and Pseudopotentials*. Zurich: University College London.
  7. Marni. 2008. *Penggunaan Carbon Nanotube (3,3) Sebagai Top Contact Metal Pada Solar Sel Untuk Meminimalkan Shadowing Loss*. Skripsi. Depok: Fakultas Teknik Universitas Indonesia.
  8. Munasir. 2004. *Semikonduktor*. Jakarta : Bagian Proyek Pengembangan Kurikulum.
  9. Young, David C. 2001. *Computational Chemistry: Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*. New York: Wiley Interscience.

