

**KARAKTERISASI TEORITIS SEMIKONDUTOR
SILICON NANOTUBE ARMCHAIR MENGGUNAKAN METODE DFT**

**(THEORETICAL CHARACTERIZATION OF ARMCHAIR SILICON NANOTUBE
BASED DFT METHOD)**

Rieska Amilia* 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 e-mail: rieskamilia@gmail.com

Abstrak. Telah dilakukan kaji teoritis dalam menentukan celah energi dari silicon nanotube armchair. Penelitian ini menggunakan metode komputasi dengan Teori Fungsi Kerapatan (DFT) pada basis set TZV2P (Triple Zeta Valence 2 Polarization). Silicon nanotube armchair (8,8-10,10) memiliki celah energi 2,745512eV, 2,402662eV, 2,323422eV. Bentuk silicon nanotube armchair lebih stabil. Silicon nanotube armchair stabil dikarenakan Orbital Pz mengalami tumpang tindih electron dengan sangat baik. Silicon nanotube armchair memiliki kecenderungan sifat semikonduktor tipe-p

Kata kunci : silicon nanotube, celah energy, semiconductor

Abstract. Theoretical studies have been conducted to determine the energy gap of armchair silicon nanotubes and zig-zag silicon nanotube. This study uses computational methods with Density Function Theory (DFT) on the basis set TZV2P (Triple Zeta Valence 2 Polarization). Armchair silicon nanotubes (8.8 to 10.10) has the energy gap 2,745512eV, 2,402662eV, 2,323422eV, zig-zag silicon. Armchair silicon nanotubes is more stable. Armchair silicon nanotubes are stable because Pz orbitals has a good overlap. Silicon armchair nanotubes have a tendency p-type semiconductor

Key words : silicon nanotube, band gap, semiconductor

PENDAHULUAN

Silikon sangat melimpah dan dapat dengan sangat mudah ditemukan. Bahan ini memiliki banyak manfaat seperti sebagai bahan dasar semikonduktor. Namun pada saat ini pemanfaatannya masih dalam skala makroskopis. Dengan perkembangan dunia nanomaterial, bahan ini dapat digunakan sebagai silikon nanomaterial yang memiliki karakter yang lebih baik dan pemanfaatan yang lebih luas. Penelitian mengenai nanomaterial silikon, diawali dari pembentukan *silicene*, yaitu lembaran yang terdiri dari atom-atom silikon. [1] mengeksplorasi banyak nilai elektronik dan magnetik dari struktur nano *silicene*.

Nano *silicene* bersifat tidak stabil dan mudah terbakar. Bahan ini juga

memiliki sifat elektronegativitas yang lebih rendah dari lembaran karbon yang disebut sebagai *graphene*. Untuk memperbaiki sifat-sifat tersebut, maka nano *silicene* perlu dimodifikasi dalam bentuk *silicon nanotube* dengan cara menggulung lembaran *silicene* dengan pola tertentu.

Silicone Nanotubes (SiNTs) merupakan suatu struktur silikon yang membentuk tabung berukuran nano, sekitar 1 - 100 nm.

Penelitian dalam bidang silikon nanomaterial sedang berkembang pesat pada beberapa tahun ini. Bentuk SiNTs dipilih karena memiliki sifat konduktifitas listrik yang sangat bervariasi dari konduktor sampai isolator. Bentuk tabung silikon memiliki ikatan antara atom-atom

Si yang berhibridisasi sp^3 dengan ikatan yang sangat kuat [3]. Sifat tabung silikon yang tidak biasa ini sangat bermanfaat dibidang nanoteknologi, elektronik, optik dan berbagai bidang ilmu dan teknologi material. Karena itu, penelitian ini di fokuskan pada bahan nanomaterial silikon yang dibentuk *nanotube*.

Penelitian ini dilakukan secara kimia komputatif dengan menggunakan metode teori kerapatan fungsioal (*Density Functional Theory /DFT*). Metode ini dipilih karena dapat memodelkan sistem molekul dengan akurat dan memberikan data dalam tingkat mikroskopik yang berkorelasi signifikan dengan hasil eksperimen laboratorium. Metode DFT juga dapat menentukan karakteristik bahan melalui proses komputasi yang lebih ringan dengan hasil nilai fisika-kimia yang sangat akurat. Sasaran utama dari teori fungsional kerapatan adalah menggantikan fungsi gelombang elektron banyak-partikel dengan kerapatan elektron sebagai besaran dasarnya. Dengan metode ini, dapat ditentukan energi HOMO dan LUMO, sehingga celah energi (*band gap*) dapat dengan mudah diperoleh.

Berdasarkan kajian di atas maka perlu dilakukan penelitian untuk mengetahui karakteristik sifat semikonduktor berdasarkan bentuk vektor kiral dari SiNTs. Ketiga jenis bentuk vektor kiral diharapkan memiliki sifat tersendiri yang berbeda satu dengan yang lainnya. Pengukuran celah energi dari ketiga jenis vektor kiral ini dimaksudkan agar dapat diketahui bentuk apa yang paling baik dalam pengaplikasiannya pada bahan semikonduktor dari perangkat elektronik.

METODE PENELITIAN

Perangkat Keras dan Lunak

Perhitungan dilakukan menggunakan komputer dengan prosesor Intel (R) Core™ i3-3217U CPU @1.80GHz x 4, RAM 5.8 GiB dan *system type 64-bit operating system*. *Software* GDIS 9.0 digunakan untuk membuat pemodelan molekul, selanjutnya CP2K 2.4

digunakan untuk melakukan semua perhitungan komputasi molekul, sedangkan VNL untuk menampilkan *bandstructure*.

Prosedur penelitian

Pembuatan Model Awal

Pemodelan struktur tiga dimensi *silicon nanotube armchair* menggunakan software GDIS 9.0. Untuk mendapatkan konfigurasi yang tepat dilakukan optimasi. Struktur *silicon nanotube armchair* yang sudah dioptimasi disimpan dengan jenis file .xyz untuk digunakan pada penelitian selanjutnya. Struktur 3D *silicon nanotube armchair* dapat digunakan sebagai senyawa awal pada penelitian ini.

Optimasi geometri

Optimasi geometri dilakukan menggunakan *Software* CP2K dengan metode DFT/LDA pada *Bassis set TZV2P (Triple Zeta Valence 2 Polarization)* untuk atom Si.

Penentuan Celah Energi (*band gap*)

Perhitungan celah energi dilakukan pada semua bentuk *silicon nanotube armchair*, agar mengetahui kemudahan eksitasi elektron.

Penggambaran *Bandstructure*

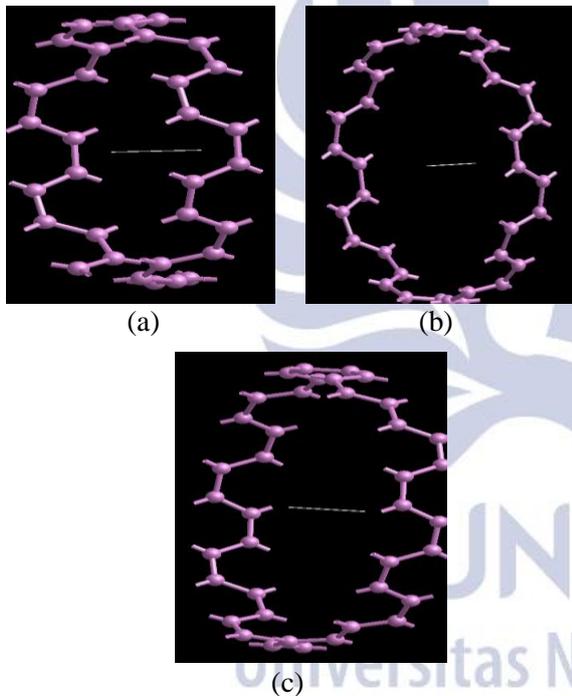
Langkah yang terakhir ialah mengetahui type semikonduktor dari *silicon nanotube armchair*, itu dapat dilihat melalui *bandstructure* yang diperoleh dengan menggunakan *Software* VNL.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil Pemodelan *Silicon Nanotube armchair*

Perhitungan menggunakan metode DFT memerlukan tingkat konvergensi yang tinggi. Tingkat konvergensi adalah senyawa yang dihitung harus simetris. Apabila senyawa kurang konvergensi maka program akan berhenti dan terjadi kesalahan. Adapun ciri-ciri struktur dengan konvergensi tinggi secara geometri adalah panjang dan sudut ikatan hasil perhitungan mendekati panjang dan sudut ikatan optimal sehingga didapatkan struktur yang paling stabil dengan geometri minimum, akan tetapi konvergensi struktur secara elektronik tidak dapat dipantau secara langsung seperti ciri-ciri konvergensi secara geometri, oleh karena itu yang mampu membacanya adalah program komputasi yang digunakan.

Struktur *silicon nanotube* dilakukan pemodelan terlebih dahulu. Pemodelan molecular merupakan suatu cara untuk menggambarkan atau menampilkan perilaku molekul atau molekul semirip dengan aslinya. Pemodelan molecular menggunakan metode-metode mekanika kuantum, mekanika molecular, analisis konformasi serta beberapa metode kimia komputasi lain yang memprediksi perilaku molekul. Pemodelan awal bukanlah bentuk yang paling stabil dari suatu molekul, oleh karena itu dibutuhkan optimasi geometri SiNT agar mendapatkan energy total yang paling rendah, yang menandakan bahwa struktur SiNT stabil.



Gambar 1. (a) Hasil pemodelan *Silicon Nanotube armchair (8,8)*, (b) Hasil pemodelan *Silicon Nanotube armchair (9,9)*, (c) Hasil pemodelan *armchair Silicon Nanotube (10,10)*,

Tabel 1. Total energi *silicon nanotube armchair*

8,8
-122,1569124 eV
9,9

-119,1896534 eV
10,10
-113,1718321 eV

Berdasarkan data dari hasil perhitungan total energi seperti table 1, secara keseluruhan total energi dari struktur *silicon nanotube armchair*, memiliki energi yang semakin besar. Total energi yang dihasilkan dari bentuk *silicon nanotube armchair(8,8)* memiliki energi total paling kecil yaitu sebesar -122,1569124 eV

Silicon nanotube memiliki struktur berlapis, yang terdiri dari empat atom silicon yang dapat membentuk jaringan heksagonal. Tiga electron valensi pada atom silicon sub kulit s dan p akan membentuk ikatan dengan 3 atom silikon lainnya yang paling dekat, sedangkan elektron keempat ada sebagai ikatan tunggal. Ikatan tunggal ini yang akan membawa informasi (sifat) dari *silicon nanotube*.

Pada bentuk *armchair (n,n)* semua orbital p diperkirakan pada satu baris dengan sumbu *silicon nanotube* dan memiliki simetri yang sama dengan atom tetangga. Orbital Pz mengalami tumpang tindih electron dengan sangat baik, sehingga stabilitas pada *silicon nanotube* bentuk *armchair* sangat tinggi. Stabilitas *silicon nanotube armchair* tinggi karena tingginya rasio hibridisasi sp^3 dan sp^2 .

Tabel 2. Celah Energi *Silicon Nanotube Armchair*

Kiralitas	Celah Energi (eV)	Diameter (Å)
8,8	2,745512	6,0008
9,9	2,402662	7,355
10,10	2,323422	7,751

Berdasarkan tabel diatas diperoleh hasil celah energi, dimana celah energi yang dihasilkan dari bentuk *silicon nanotube armchair(10,10)* lebih kecil

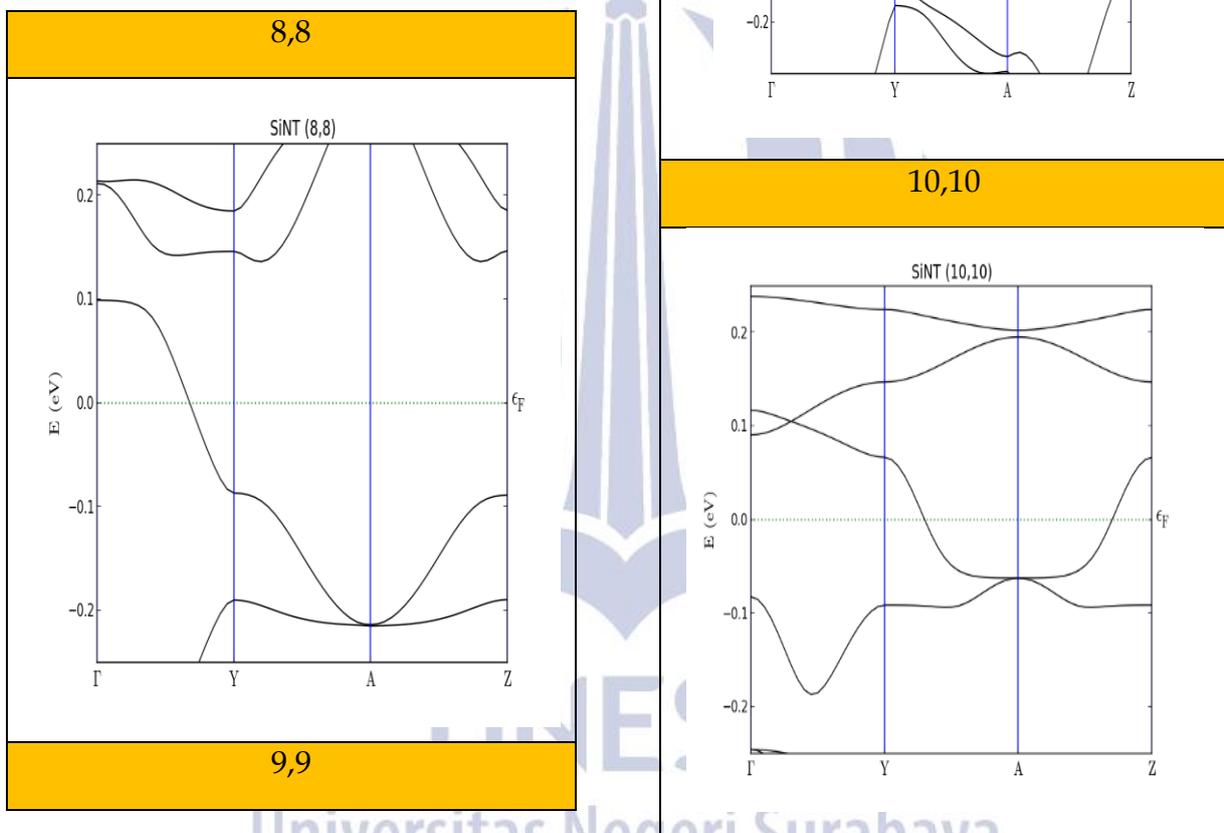
Semakin besar kiralitas dari SiNTs menghasilkan diameter yang semakin besar dan celah energi yang semakin kecil. Semakin besar diameter karena kiralitas semakin besar menyebabkan jumlah elektron SiNTs semakin banyak. Hal ini meningkatkan tumpang tindih orbital

yang mengarah pada perbedaan nilai celah energy [4]:

$$E_{gap} = \frac{2y_0 a_{SiSi}}{d}$$

dengan y_0 adalah energi ikat antar atom Si, a_{SiSi} adalah jarak terdekat antar atom Si, dan d adalah diameter, sehingga apabila nilai penyebut (diameter) lebih besar dari nilai pembilang maka nilai akhir (E_g) yang dihasilkan semakin kecil.

Tabel 3. Bandstructure dari silicon nanotube armchair



Silicon nanotube merupakan semikonduktor intrinsik. Namun dilihat dari hasil band structure yang dihasilkan pada tabel 3, SiNTs memiliki kecenderungan lebih mengarah pada tipe-p atau tipe-n dilihat dari kedekatan antara energi fermi (garis horizontal terputus) dengan garis-garis bergelombang mengarah secara horizontal yang menunjukkan orbital yang berada dalam Brillouin Zone (Γ, Y, A, Z). Brillouin Zone pada titik M, K, X, dan Γ dapat menghasilkan celah energi, ini

dikarenakan energi maksimum dan minimum dari celah energi jatuh pada titik-titik tersebut [5]. Dalam visualisasi *band structure* dari SiNTs dilihat dari kedekatan energi fermi dengan orbital-orbital (LUMO/HOMO) yang berada pada titik gamma (Γ), sehingga dapat diketahui SiNTs kecenderungan tipe semikonduktor. Semakin banyak garis gelombang horizontal pada *band structure*, menunjukkan bahwa semakin banyak orbital yang terlibat. Pada *silicon nanotube armchair* (8,8) akan memiliki kecenderungan tipe-n, ditunjukkan pada energi fermi yang berdekatan dengan orbital LUMO pada titik Γ . Pada *band structure* yang dihasilkan, garis orbital *silicon nanotube armchair* (8,8) sedikit dari kedua bentuk lainnya, *silicon nanotube armchair* memiliki bentuk paling kecil maka orbital yang terlibat sedikit.

Berdasarkan tabel 3 diatas, energi fermi dari *silicon nanotube armchair* yang cenderung mendekati HOMO (pita valensi), sehingga dapat dikatakan bahwa SiNTs *armchair* memiliki kecenderungan sifat semikonduktor tipe-p.

DAFTAR PUSTAKA

1. Banacký, Pavol. Jozef Noga. Vojtech Szöcs. 2012. Electronic structure of single-wall silicon nanotubes and silicon nanoribbons: Helical symmetry treatment and effect of dime. Slovak Academy of Sciences, *Dubravska cesta* 9, 84536.
2. Verma, V., Dharamvir, K. & Jindal, V.K. 2008. Structure and Elastic Modulii Of Silicon Nanotubes. *Journal of Nano Research*, Vol. 2 halaman : 85-90
3. Marni. 2008. *Penggunaan Carbon Nanotube (3,3) Sebagai Top Contact Metal Pada Solar Sel Untuk Meminimalkan Shadowing Loss. Skripsi*. Depok: Fakultas Teknik Universitas Indonesia.
4. Young, David C. 2001. *Computational Chemistry: Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*. New York: Wiley Interscience.