

**PENGARUH DOPING ATOM BORON (B) DAN NITROGEN
(N) TERHADAP SIFAT OPTIK LINIER SILICENE DENGAN
PENDEKATAN TEORI FUNGSI KERAPATAN**

SKRIPSI

oleh

ALMO ELGHIFARI MARTIVIANSYAH GHOZALI

135090300111020



**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS BRAWIJAYA
MALANG
2017**

**PENGARUH DOPING ATOM BORON (B) DAN NITROGEN
(N) TERHADAP SIFAT OPTIK LINIER SILICENE DENGAN
PENDEKATAN TEORI FUNGSI KERAPATAN**

SKRIPSI

Sebagai Salah Satu Syarat Untuk Memperoleh Gelar
Sarjana Sains Dalam Bidang Fisika

oleh:

ALMO ELGHIFARI MARTIVIANSYAH GHOZALI

135090300111020



**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS BRAWIJAYA
MALANG
2017**

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

**PENGARUH DOPING ATOM BORON (B) DAN NITROGEN
(N) TERHADAP SIFAT OPTIK LINIER SILICENE DENGAN
PENDEKATAN TEORI FUNGSI KERAPATAN**

oleh:

Almo Elghifari Martiviansyah Ghozali

135090300111020

Setelah dipertahankan di depan Majelis Penguji

pada tanggal 8 Agustus 2017

**dan dinyatakan memenuhi syarat untuk memperoleh gelar Sarjana
Sains dalam bidang fisika**

Pembimbing I

Pembimbing II

Mauludi Ariesto Pamungkas, Ph.D

NIP. 197208061995121001

Dr. rer. nat. Abdurrouf, M.Si

NIP. 197209031994121001

Mengetahui,

Ketua Jurusan Fisika

Fakultas MIPA Universitas Brawijaya

Prof. Dr. rer.nat. Muhammad Nurhuda

NIP. 19640910 199002 1 001

LEMBAR PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Almo Elghifari Martiviansyah G.
Nim : 135090300111020
Jurusan : Fisika
Penulis Skripsi berjudul :

PENGARUH DOPING ATOM BORON (B) DAN NITROGEN (N) TERHADAP SIFAT OPTIK LINIER SILICENE DENGAN PENDEKATAN TEORI FUNGSI KERAPATAN

Dengan ini menyatakan bahwa :

1. Isi dari Skripsi yang saya buat adalah benar-benar karya sendiri dan tidak menjiplak karya orang lain, selain nama-nama yang termaktub di isi dan tertulis di daftar pustaka dalam skripsi ini.

Apabila dikemudian hari ternyata Skripsi yang saya tulis terbukti hasil jiplakan, maka saya akan bersedia menanggung segala resiko yang akan saya terima.

Demikian pernyataan ini dibuat dengan segala kesadaran.

Malang, 27 Juli 2017

Yang Menyatakan

ALMO ELGHIFARI MARTIVIANSYAH GHOZALI

NIM. 135090300111020

PENGARUH DOPING ATOM BORON (B) DAN NITROGEN (N) TERHADAP SIFAT OPTIK LINIER SILICENE DENGAN PENDEKATAN TEORI FUNGSI KERAPATAN

ABSTRAK

Silicene merupakan bahan monolayer dari atom silikon yang tersusun atas atom-atom silikon yang berbentuk heksagonal 2D yang mirip dengan graphene. Penggunaan *silicene* sudah dimulai pada penelitian yang dilakukan oleh Takeda dan Shiraishi pada 1994. *Silicene* lebih kuat ikatannya dibandingkan dengan graphene dikarenakan *silicene* memiliki *Spin Orbit Coupling* (SOC). Dengan Teori Fungsi Kerapatan, secara komputasi bisa dilakukan pemodelan terhadap atom *silicene* untuk diketahui sifat optiknya. Penggunaan doping untuk atom Boron (B) dan Nitrogen menambah variasi untuk diketahui sifat optiknya. Hasil penelitian ini adalah membuat nilai indeks bias *silicene*, jika didoping B atau N akan menjadikan nilai indeks bias pada energi rendah tetapi nilainya kecil. Pada reflektifitas akan membuat nilainya semakin kecil dan lebih fluktuatif pada energi rendah. Begitu pula pada nilai koefisien absorpsi. Berbeda jika didoping dengan atom Boron Nitrid (BN), hasilnya akan lebih fluktuatif dan posisi akan menghasilkan nilai yang berbeda diluar dari sifat optik dengan satu doping pada umumnya.

Kata kunci : Teori Fungsi Kerapatan, *Silicene*, Sifat optik, Indeks bias, reflektifitas, koefisien absorpsi

EFFECT OF DOPING BORON (B) AND NITROGEN (N) FOR LINIER OPTIC PROPETIES OF SILICENE WITH DENSITY FUNCTIONAL THEORY APPROXIMATION (DFT)

ABSTRACT

Silicene is a monolayer material of atomic atoms composed of 2D atomic hexagonal atoms similar to graphene. The use of silicene has already begun in research conducted by Takeda and Shiraishi in 1994. Silicene stronger bonds with graphene result in silicene having Spin Orbit Coupling (SOC). With Density Function theory, modeling of silicene atoms can be known for their optical properties. The use of doping for atoms of Boron (B) and Nitrogen adds variation to known optical properties. The result of this research is to make the refractive index of silicene, if doped B or N will make the refractive index at low energy. On reflection will be higher and more volatile at low energy. Similarly, on absorption. When compared to Boron Nitrid (BN) atoms, the result will be more fluctuating and the position will result in a different optical properties with one doping in general.

Keywords: Density Function Theory, Silicene, Optical properties, Refractive index, reflectivity, absorption coefficient

KATA PENGANTAR

Segala puji syukur penulis panjatkan atas kehadiran Allah SWT , Tuhan semesta alam karena berkat rahmat dan kemudahan-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul **“Pengaruh Doping Atom Boron (B) Dan Nitrogen (N) Terhadap Sifat Optik Linier *Silicene* Dengan Pendekatan Teori Fungsi Kerapatan”** . Skripsi ini ditulis sebagai salah satu syarat kelulusan dalam menempuh S1 Fisika. Penulisan skripsi ini tidak lepas dari dukungan dan bantuan dari banyak pihak , maka dalam kesempatan ini penulis menyampaikan terima kasih kepada :

1. Mama, Papa, Adek, dan seluruh keluarga besar atas segala dukungan, semangat, perhatian, dan doa yang selalu dipanjatkan sehingga skripsi ini dapat diselesaikan dengan sebaik-baiknya.
2. Bapak Mauludi Ariesto P., S.Si, M.Si. Ph.D. selaku pembimbing pertama yang telah dengan sabar menyediakan banyak waktu, tenaga, saran, dan bimbingannya dari pengajuan judul sampai dengan selesainya dalam skripsi ini.
3. Bapak rer.nat. Abdurouf, S.Si, M.Si . selaku dosen pembimbing dosen pembimbing kedua menyediakan banyak waktu, tenaga, saran, dan bimbingannya dari pengajuan judul sampai dengan selesainya dalam skripsi ini.
4. Seluruh Bapak/Ibu dosen jurusan Fisika yang telah memberi arahan, pengejaran ilmu yang sangat berguna bagi penulis untuk menyelesaikan skripsi ini.
5. Teman seperjuangan dan sekelompok skripsi ini, Fikri, Desi, dan Tri yang saling menyemangati dan saling mengingatkan di kala sedang jenuh maupun sedang lesu.
6. Sahabat-sahabat yang ada di HIMAWARKOP yang dengan kompaknya dan selalu solid berlomba untuk menyelesaikan tulisan skripsinya yang selalu memberikan dukungan secara semangat moral agar penulis cepat menyelesaikan skripsinya.

7. Teman – teman kontrakan yang selalu mendukung penulis dengan bantuan moril maupun materi yang selalu membantu penulis agar memberikan suasana tempat yang kondusif sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini.
8. Terimakasih juga kepada Hervina Zaprilla, S.T. yang selalu membantu, menyemangati, memberikan arahan serta masukan sehingga penulis selalu bersemangat dalam menyelesaikan skripsi ini. Serta pihak-pihak lain yang mendukung yang tidak bias penulis sebutkan satu per satu.

Penulis menyadari bahwa dalam penulisan skripsi ini masih banyak kekurangan baik dari segi isi maupun penyajian yang masih jauh dari kesempurnaan. Untuk itu penulis mengharapkan kritik dan saran yang bersifat membangun guna membantu perbaikan dan menyempurnakan skripsi ini. Semoga tulisan skripsi ini menjadi pedoman dan acuan untuk penelitian yang akan datang.

Malang, 27 Juli 2017

Penulis

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI	i
LEMBAR PERNYATAAN	iii
ABSTRAK	v
ABSTRACT	vii
KATA PENGANTAR	ix
DAFTAR ISI	xi
DAFTAR GAMBAR	xv
DAFTAR TABEL	xxi
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	4
1.3 Batasan Masalah.....	4
1.4 Tujuan Penelitian.....	4
1.5 Manfaat Penelitian.....	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	7
2.1 Kristal	7
2.2 Kisi Balik.....	9
2.3 Hibridisasi Orbital	10
2.4 Ikatan Kristal	12
2.5 Pita Energi	13
2.6 Semikonduktor.....	13
2.7 Unsur	15
2.7.1 Silikon	15
2.7.2 Boron.....	16
2.7.3 Nitrogen.....	17
2.8 Optik.....	18
2.8.1 Linier Optik	18
2.8.2 Fungsi Dielektrik.....	19
2.8.3 Refleksi, Indeks Bias, dan Absorpsi.....	21
2.8.4 Kerapatan Keadaan atau <i>Density Of States</i> (DOS)	23

2.8.5	Response Function.....	24
2.9	Teori Fungsi Kerapatan atau <i>Density Functional Theory</i> (DFT).....	24
2.9.1	Persamaan Schrodinger	25
2.9.2	Teorema Hohenberg - Kohn	26
2.9.3	Teorema Kohn – Sham	27
2.9.4	Teorema Bloch	29
2.10	Software ABINIT.....	29
BAB III METODE PENELITIAN		31
3.1.	Waktu dan Tempat Pelaksanaan	31
3.2.	Metode Penelitian	31
3.3.	Rancangan Penelitian.....	32
3.3.1	Persiapan Perhitungan	34
3.3.2	Doping Atom	34
3.3.3	Doping Atom BN.....	35
3.3.4	Perhitungan.....	36
3.3.4.1	Fungsi Dielektrik	36
3.3.4.2	Energi Pembentukan	37
BAB IV PEMBAHASAN DAN HASIL		39
4.1	Tes Konvergensi	39
4.1.1	Tes Konvergensi Nilai Energi <i>Cut-off</i> (ecut).....	39
4.1.2	Tes Konvergensi Nilai Jumlah Titik Kisi Untuk Setiap <i>K-Point</i> (ngkpt).....	40
4.1.3	Tes Konvergensi Banyak Pengulangan atau Iterasi (nstep)	41
4.1.4	Tes Konvergensi Nilai Parameter Kisi atau Vektor Skala Kisi (acell)	42
4.2	Tes Benchmark	43
4.3	Sifat Optik.....	47
4.3.1	Silicene Murni atau <i>Pristine</i>	48
4.3.2	Silicene Doping Boron (B)	52
4.3.2.1	Posisi Bridge	52

4.3.2.2	Posisi Hollow.....	56
4.3.2.3	Posisi Top.....	59
4.3.3	Silicene Doping Nitrogen (N)	63
4.3.3.1	Posisi Bridge.....	63
4.3.3.2	Posisi Hollow.....	67
4.3.3.3	Posisi Top.....	71
4.3.4	Silicene Doping Boron Nitrid (BN)	75
4.3.4.1	Posisi Bridge-Bridge	75
4.3.4.2	Posisi Bridge-Hollow	79
4.3.4.3	Posisi Bridge-Top.....	82
4.3.4.4	Posisi Hollow-Hollow	86
4.3.4.5	Posisi Hollow-Bridge	90
4.3.4.6	Posisi Hollow-Top.....	94
4.3.4.7	Posisi Top-Top	98
4.3.4.8	Posisi Top-Bridge.....	102
4.3.4.9	Posisi Top-Hollow.....	106
BAB V	PENUTUP.....	111
5.1	Kesimpulan.....	111
5.2	Saran.....	112
	DAFTAR PUSTAKA	113
	LAMPIRAN	110

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Struktur Kristal <i>Silicene</i> . Kisi berbentuk heksagonal, dengan basis terdiri dari 2 atom Si dengan label A dan B (Voon, 2016).	8
Gambar 2.2 Struktur Graphite (sisi kanan) dan kisi baliknya (sisi kiri) (Gray <i>et al.</i> , 2009).	9
Gambar 2.3 Bentuk-bentuk orbital atom (Prasojo, 2014).	10
Gambar 2.4 Bentuk orbital <i>s</i> dan <i>p</i> serta hibrida-nya (Cahangirov <i>et al.</i> , 2013).	11
Gambar 2.5 Struktur pita energi pada (a) insulator, (b) semikonduktor, dan (c) metal (Johansen 2007)	14
Gambar 2.6 Skematik Ikatan antara Atom pada Kisi Si dengan <i>doping</i> Boron (Johansen 2007).	15
Gambar 2.7 Grafik fungsi dielektrik silikon murni (Mansour <i>et al.</i> , 2008).	20
Gambar 2.8 Grafik fungsi dielektrik <i>silicene</i> murni dengan beberapa bagian, ϵ_1 merupakan bagian riil dan ϵ_2 merupakan bagian imajiner (Chinnathambi <i>et al.</i> , 2012)	20
Gambar 2.9 Refleksi dan refraksi pada suatu bidang, terjadi interferensi sehingga menimbulkan 2 kejadian yang sama (Pedrotti <i>et al.</i> , 2008).	22
Gambar 2.10 Kerapatan keadaan atau <i>Density Of State</i> (DOS) dalam satu dimensi (Kittel, 2005).	24
Gambar 3.1 (a) Teknik pemilihan supersel (b) supersel 2x2 dan unit sel (c) sumbu z dengan jarak 15 Angstrom.....	32
Gambar 3.2 Diagram alir penelitian.....	33
Gambar 3.3 Bentuk struktur adsorpsi atom dengan 3 posisi berbeda : T (Top), H (Hollow), dan B (Bridge).	36
Gambar 4.1 Hasil Tes Konvergensi ecut Untuk <i>Silicene</i>	40
Gambar 4.2 Hasil Tes Konvergensi ngkpt Untuk <i>Silicene</i>	41
Gambar 4.3 Hasil Tes Konvergensi nstep Untuk <i>Silicene</i>	42

Gambar 4.4 Hasil Tes Konvergensi acell Untuk Silicene.	43
Gambar 4.5 Perbandingan Perhitungan Konstanta Dielektrik Silikon Pristine (a) Jurnal (b) Hasil Perhitungan Penelitian.	44
Gambar 4.6 Perbandingan Perhitungan Konstanta Dielektrik Silicene Pristine (a) Jurnal (b) Hasil Perhitungan Penelitian.	45
Gambar 4.7 Perbandingan Perhitungan Konstanta Dielektrik GaAs (a) Hasil Perhitungan Penelitian (b) Jurnal.	45
Gambar 4.8 Indeks Bias Silicene Pristine (a) Bagian Riil (b) Bagian Imajiner.	49
Gambar 4.9 Refleksi Silicene Pristine.	50
Gambar 4.10 Koefisien Absorbsi Silicene Pristine.	51
Gambar 4.11 Indeks Bias Silicene Posisi Bridge Doping Boron (a) Bagian Riil (b) Bagian Imajiner.	53
Gambar 4.12 Refleksi Silicene Posisi Bridge Doping Boron.	54
Gambar 4.13 Koefisien Absorbsi Silicene Posisi Bridge Doping Boron.	55
Gambar 4.14 Indeks Bias Silicene Posisi Hollow Doping Boron (a) Bagian Riil (b) Bagian Imajiner.	57
Gambar 4.15 Refleksi Silicene Posisi Hollow Doping Boron.	58
Gambar 4.16 Koefisien Absorbsi Silicene Posisi Hollow Doping Boron.	59
Gambar 4.17 Indeks Bias Silicene Posisi Top Doping Boron (a) Bagian Riil (b) Bagian Imajiner.	60
Gambar 4.18 Refleksi Silicene Posisi Top Doping Boron.	61
Gambar 4.19 Koefisien Absorbsi Silicene Posisi Top Doping Boron.	62
Gambar 4.20 Indeks Bias Silicene Posisi Bridge Doping Nitrogen (a) Bagian Riil (b) Bagian Imajiner.	64
Gambar 4.21 Refleksi Silicene Posisi Bridge Doping Nitrogen.	65

Gambar 4.22	Koefisien Absorpsi Silicene Posisi Bridge Doping Nitrogen.	66
Gambar 4.23	Indeks Bias Silicene Posisi Hollow Doping Nitrogen (a) Bagian Riil (b) Bagian Imajiner.	68
Gambar 4.24	Refleksi Silicene Posisi Hollow Doping Nitrogen.	69
Gambar 4.25	Koefisien Absorpsi Silicene Posisi Hollow Doping Nitrogen.	70
Gambar 4.26	Indeks Bias Silicene Posisi Top Doping Nitrogen (a) Bagian Riil (b) Bagian Imajiner.	72
Gambar 4.27	Refleksi Silicene Posisi Top Doping Nitrogen.	73
Gambar 4.28	Koefisien Absorpsi Silicene Posisi Top Doping Nitrogen.	74
Gambar 4.29	Indeks Bias Silicene Bridge – Bridge Doping Boron Nitrid (a) Bagian Riil (b) Bagian Imajiner.	76
Gambar 4.30	Refleksi Silicene Bridge – Bridge Doping Boron Nitrid.	77
Gambar 4.31	Koefisien Absorpsi Silicene Bridge – Bridge Doping Boron Nitrid.	78
Gambar 4.32	Indeks Bias Silicene Bridge – Hollow Doping Boron Nitrid (a) Bagian Riil (b) Bagian Imajiner.	80
Gambar 4.33	Refleksi Silicene Bridge – Hollow Doping Boron Nitrid.	81
Gambar 4.34	Koefisien Absorpsi Silicene Bridge – Hollow Doping Boron Nitrid.	82
Gambar 4.35	Indeks Bias Silicene Bridge – Top Doping Boron Nitrid (a) Bagian Riil (b) Bagian Imajiner.	83
Gambar 4.36	Refleksi Silicene Bridge – Top Doping Boron Nitrid.	84
Gambar 4.37	Koefisien Absorpsi Silicene Bridge – Top Doping Boron Nitrid.	85
Gambar 4.38	Indeks Bias Silicene Hollow – Hollow Doping Boron Nitrid (a) Bagian Riil (b) Bagian Imajiner.	87

Gambar 4.39	Refleksi Silicene Hollow – Hollow Doping Boron Nitrid.	88
Gambar 4.40	Koefisien Absorpsi Silicene Hollow – Hollow Doping Boron Nitrid.	89
Gambar 4.41	Indeks Bias Silicene Hollow – Bridge Doping Boron Nitrid (a) Bagian Riil (b) Bagian Imajiner.	91
Gambar 4.42	Refleksi Silicene Hollow – Bridge Doping Boron Nitrid.	92
Gambar 4.43	Koefisien Absorpsi Silicene Hollow – Bridge Doping Boron Nitrid.	93
Gambar 4.44	Indeks Bias Silicene Hollow – Top Doping Boron Nitrid (a) Bagian Riil (b) Bagian Imajiner.	95
Gambar 4.45	Refleksi Silicene Hollow – Top Doping Boron Nitrid.	96
Gambar 4.46	Koefisien Absorpsi Silicene Hollow – Top Doping Boron Nitrid.	97
Gambar 4.47	Indeks Bias Silicene Top – Top Doping Boron Nitrid (a) Bagian Riil (b) Bagian Imajiner.	99
Gambar 4.48	Refleksi Silicene Top – Top Doping Boron Nitrid.	100
Gambar 4.49	Koefisien Absorpsi Silicene Top – Top Doping Boron Nitrid.	101
Gambar 4.50	Indeks Bias Silicene Top – Bridge Doping Boron Nitrid (a) Bagian Riil (b) Bagian Imajiner.	103
Gambar 4.51	Refleksi Silicene Top – Bridge Doping Boron Nitrid.	104
Gambar 4.52	Koefisien Absorpsi Silicene Top – Bridge Doping Boron Nitrid.	105
Gambar 4.53	Indeks Bias Silicene Top – Hollow Doping Boron Nitrid (a) Bagian Riil (b) Bagian Imajiner.	107
Gambar 4.54	Refleksi Silicene Top – Hollow Doping Boron Nitrid.	108

Gambar 4.55 Koefisien Absorpsi Silicene Top – Hollow Doping
Boron Nitrid.109

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Komposisi Orbital Hibrida (Cahangirov <i>et al.</i> , 2013)	11
Tabel 2.2 Sifat Fisik dan Kimia Unsur Silikon (Lide <i>et al.</i> , 2008).....	16
Tabel 2.3 Sifat Fisik dan Kimia Unsur Boron (Jensen, 2007)	17
Tabel 2.4 Sifat Fisik dan Kimia Unsur Nitrogen (Syukri, 1999).....	18

