

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Pada saat ini, kemajuan teknologi sangatlah pesat terutama dalam bidang digital dan elektronik. Kemajuan teknologi tidak hanya dalam segi kegunaan saja tetapi juga dalam segi ukuran yang sudah menjadi lebih kecil dan lebih portabel. Untuk membuat barang elektronik dalam bentuk kecil dibutuhkan sebuah rekayasa serta inovasi dalam bidang bahan listrik (*material electronic*) contohnya pada chip serta transistor (Junaidi & Susanti, 2013).

Graphene merupakan salah satu material yang sudah berkembang dan sudah ditemukan sejak tahun 2004. Graphene berbentuk 2 dimensi, karena graphene adalah bentuk 2 dimensi dari karbon dan memiliki sifat elektronik yang unggul (Ilhami & Susanti 2014). Mempelajari graphene akan mendapatkan aspek baru dalam pembelajaran tentang interaksi e-ph dalam sebuah sistem temperatur rendah dan dalam kaitannya dengan bentuk graphene. Sifat graphene dalam bidang atomik tunggal, struktur graphene tidak harus dalam 2 dimensi tetapi akan menjadi 2 dimensi jika pada keadaan fonon akustik. Graphene juga berperilaku seperti halnya partikel *Dirac* yang memiliki kecepatan *Fermi* sebesar 1/100 dari kecepatan cahaya sehingga konduktivitasnya tinggi (Efetov & Kim, 2010). Graphene saat ini menjadi fokus dari para fisikawan dan kimiawan serta ilmuwan dalam bidang material fokus untuk mempelajari sifat dari graphene serta bagaimana aplikasi dari graphene terhadap bidang industri karena dalam graphene tersebut memiliki sifat mobilitas elektron yang tinggi, $\sim 10.000 \text{ cm}^2/\text{V.s}$, lalu efek quantum-Hall pada temperatur ruang, transparansi optik yang baik, 97,7%, luas permukaan spesifik, $2,630 \text{ m}^2/\text{g}$, dan konduktivitas panas, $\sim 3000\text{W/m.K}$, (Suwandana & Susanti, 2015).

Penemuan akan graphene pada 2004 memberikan dampak yang positif serta dengan sifat-sifatnya yang unik memberikan dampak keingintahuan dan harapan bagi para peneliti untuk menemukan hal yang sama dari material 2 dimensi lain seperti halnya graphene tetapi dengan material dasar yang berbeda tetapi susunannya sama. Material dasar tentu harus menjadi golongan yang sama dengan Karbon karena untuk membandingkan antara keduanya, lalu hal ini dapat dikaji mengenai sifat magnetiknya, sifat elektroniknya, maupun sifat optiknya (Wella *et al.*, 2014). Pada tahun 1994, Takeda dan Shiraishi, meneliti tentang Germanium (*Ge*) dan Silikon (*Si*) sebagai analogi dari grafit dan membahas bentuk planar dari lapisan tunggal 2 dimensi Si dan Ge dengan menggunakan perhitungan *first-principal*, mereka menemukan bahwa dua sub-kisi dari *silicene* lebih relatif bergeser dalam arah tegak lurus terhadap bidang atom, bentuk ini disebut struktur *low-bucked* (Zhao *et al.*, 2016). Untuk itu menarik jika meneliti *silicene* sebagai substrat lain selain graphene.

Silicene merupakan monolayer dari silikon dan kisinya berbentuk *honeycomb*. *Silicene* memiliki sifat yang unik sehingga perlu diadakan suatu penelitian secara teoritis dan praktik mengenai *silicene*. Dalam *silicene* terdapat *Dirac* seperti dispersi elektron pada K point dalam *brillouine zone*. Karena graphene atau *silicene* ada pada kolom yang sama dalam tabel periodik. Tetapi *silicene* memiliki *Spin Orbit Coupling* (SOC) yang lebih kuat dibanding graphene artinya ikatan dalam *silicene* lebih kuat daripada graphene (Aftab, 2017). *Silicene* merupakan bentuk planar yang tidak stabil dibandingkan dengan graphene. *Silicene* akan lebih meluapkan energi pada struktur *low-bucked* (sedikit melengkung). Kelengkungan ini yang menjadi kelebihan dari *silicene* terhadap graphene, karena secara prinsip akan menghasilkan band gap yang baik dan keadaan spin yang terpolarisasi dan kemudian keadaan tersebut akan mudah jika dikontrol dengan medan listrik yang tegak lurus. Dalam melihat sifat dari *silicene* dapat menggunakan perhitungan *ab initio* atau dikenal dengan *Density Functional Theory* (DFT), lalu dapat

menggunakan *Scanning Tunneling Spectroscopy* (STS) yang berguna dalam melihat sifat elektronik dari silicene (Roman & Cranford 2013). Dalam silicene, nilai panjang ikatan dan sudut ikatan antara silicene dengan atom lain yaitu sebesar 2,309 Å dan 115,4 °, sebagai catatan untuk nilai dari sudut silicene pada hibridisasi sp² adalah 120° dan untuk hibridisasi sp³ adalah 109,47°. Sehingga jarak ikatan silicene dengan atom lain lebih lebar dibandingkan jarak graphene dengan atom lain. Sehingga dalam silicene lekukan akan lebih besar dan daling tumpang tindih (dalam struktur band gap silicene) ketika orbital lebih mengarah ke energi ikat yang lebih tinggi (Kamal *et al.*, 2016).

Dalam penggunaan atom pengganti untuk B, N, Al, atau P dalam sp³ lebih reaktif daripada digunakan untuk sp². Dan untuk silicene dapat dihibridisasi menjadi sp³. Dalam doping pengganti untuk silicene, atom B, N, Al, dan P memiliki adsorpsi dan penyerapan pada permukaan murni silicene bebas sehingga strukturnya akan lebih stabil dan didapatkan sifat elektronik, magnetik, dan fonon. Adsorpsi B, N, dan P lebih kuat ikatannya jika dalam silicene (Sivek *et al.*, 2013). Boron Nitrida merupakan material yang memiliki potensial yang besar dalam hal adsorpsi, spintronics, dan medan magnet permanen (Wang *et al.*, 2017). Atom Boron (*B*) dan Nitrogen (*N*) merupakan doping yang sering digunakan dalam mendoping silicene. Karena untuk mendoping golongan 4A digunakan elektron bernilai 3 dan 5, karena akan lebih stabil jika nilai elektronnya 3 dan 5. Atom B dan N terletak pada golongan 3A dan 5A sehingga masing-masing memiliki elektron 3 dan 5.

Density Functional Theory (DFT) merupakan metode yang digunakan dalam bidang komputasi dengan menggunakan persamaan Schrödinger, karena dengan menggunakan DFT, pendekatan yang dipakai adalah pendekatan Hatree-Fox yang memiliki singularitas terhadap bahan dengan zero-gap dan semi zero-gap (semikonduktor) (Burke, 2012). DFT adalah teori tentang struktur *ground state*

elektronik, dan ditulis dalam istilah distribusi dari rapat elektronik $n(r)$ (Kohn *et al.*, 1996). Dalam DFT ini digunakan karena dalam penelitian ini memberikan keseimbangan antara akurasi dan rumitnya perhitungan sehingga memudahkan untuk mendapatkan hasilnya.

Pada penelitian ini menggunakan struktur dan sifat optik dari substrat Silicene sebelum dan sesudah didoping oleh atom Boron (*B*) dan Nitrogen (*N*). Selanjutnya struktur dan sifat optik akan ditinjau dengan menggunakan *Density Functional Theory* (DFT).

1.2 Rumusan Masalah

Dari latar belakang di atas, didapatkan rumusan masalah sebagai berikut :

1. Bagaimana pengaruh doping atom B terhadap sifat optik silicene dari hasil perhitungan *density functional theory*?
2. Bagaimana pengaruh doping atom N terhadap sifat optik silicene dari hasil perhitungan *density functional theory*?
3. Bagaimana pengaruh doping atom BN terhadap sifat optik silicene dari hasil perhitungan *density functional theory*?

1.3 Batasan Masalah

Sesuai dengan latar belakang dan rumusan masalah, maka batasan masalah pada penelitian ini adalah :

1. Sifat optik silicene yang dihitung hanya berdasarkan *norm-conserving pseudopotential* dan yang dihitung hanya sel 2×2 .
2. Sifat optik hanya dianalisa berdasarkan konstanta dielektrik, indeks bias riil dan imajiner, refleksi, dan koefisien absorpsi.
3. Perhitungan dilakukan dalam keadaan *ground state*.

1.4 Tujuan Penelitian

Tujuan dari dilaksanakannya penelitian ini adalah untuk mengetahui pengaruh atom B, N dan atom BN yang didoping dengan

atom Silicene terhadap sifat optik Silicene dari hasil perhitungan *Density Functional Theory*.

1.5 Manfaat Penelitian

Hasil penelitian pengaruh atom B dan atom N yang didoping dengan Silicene diharapkan dapat menjadi acuan ilmiah sebagai dasar pertimbangan para eksperimentalis yang menerapkannya dalam uji laboratorium secara langsung.

{halaman sengaja dikosongkan}