

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER
PENGARUH VARIASI TEMPERATUR TERHADAP PROSES
NITROGENASI SILIKON AMORF**

SKRIPSI

oleh:
**CHOIRUN NISA
125090300111001**



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

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER
PENGARUH VARIASI TEMPERATUR TERHADAP PROSES
NITROGENASI SILIKON AMORF**

SKRIPSI

Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana sains dalam bidang fisika

oleh:
CHOIRUN NISA
125090300111001



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

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI
SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER PENGARUH
VARIASI TEMPERATUR TERHADAP PROSES
NITROGENASI SILIKON AMORF

oleh:
CHOIRUN NISA
125090300111001

Setelah dipertahankan di depan Majelis Penguji
pada tanggal 08 Agustus 2017
dan dinyatakan memenuhi syarat untuk memperoleh gelar Sarjana S
ains dalam bidang fisika

Pembimbing I

Pembimbing II

Mauludi Ariesto P, Ph.D
NIP.197304122000031013

Dr. Istiroyah, S.Si., MT
NIP.197408151999032002

Mengetahui,
Ketua Jurusan Fisika
Fakultas MIPA Universitas Brawijaya

Prof. Dr. Muhammad Nurhuda
NIP.196409101990021001

IDENTITAS TIM PENGUJI

MODERATOR

NAMA : Mauludi Ariesto Pamungkas, M.Si.,Ph.D
NIP : 197304122000031013
NIDN : 0012047302
BIDANG ILMU : Fisika Material

PENGUJI I

NAMA : Firdy Yuana, S.Si, M.Si
NIP : 198003292005022007
NIDN : 0029038002
BIDANG ILMU : Fisika Medis

PENGUJI II

NAMA : Dr. Istiroyah, S.Si., MT
NIP : 197408151999032002
NIDN : 0015087405
BIDANG ILMU : Teknik Material

LEMBAR PERNYATAAN

Saya yang bertandatangan di bawahini:

Nama : Choirun Nisa
Nim : 125090300111001
Jurusan : Fisika
Penulis Skripsi berjudul :

SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER PENGARUH VARIASI TEMPERATUR TERHADAP PROSES NITROGENASI SILIKON AMORF

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 daftarpustaka dalam Skripsi ini.
2. 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, 12 Juni 2017
Yang Menyatakan

CHOIRUN NISA
NIM.125090300111001

DAFTAR RIWAYAT HIDUP



Data Pribadi

Nama : Choirun Nisa'
Tempat / Tanggal Lahir : Sumenep, 2 September 1993
Alamat Rumah : Jl. Srikandi Blok Q No.8 Perum
Japan Raya RT/RW 04/11 Dusun
Japan Desa Japan Kec.Sooko
Kab.Mojokerto Jawa Timur
Email : ch.nisa99@gmail.com
Nomor Telepon : 083839960393
Jenis Kelamin : Perempuan
Agama : Islam
Status : Menikah
Riwayat Pendidikan :

No	Sekolah/Universitas	Tahun
1.	Jurusan Fisika Fakultas MIPA Universitas Brawijaya	2012- Sekarang
2.	SMA Al-Multazam	2008-2011
3.	Mts. Al-Multazam	2005-2008
4.	MI. Mamba'ul Hidayah	1999-2005

Pengalaman Kepanitiaan :

Nama Kepanitiaan	Jabatan	Tahun
Panitia PROBINMABA	Staff Pendamping	2013

SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER PENGARUH VARIASI TEMPERATUR TERHADAP PROSES NITROGENASI SILIKON AMORF

ABSTRAK

Silikon nitrida amorf ($a\text{-SiN}_x$) merupakan salah satu material yang sangat cocok untuk digunakan dalam pembuatan *memory device*. Hal ini dikarenakan $a\text{-SiN}_x$ memiliki struktur cacat ikatan tinggi yang mempengaruhi sifat elektronik dan sifat optik materialnya, salah satunya adalah peristiwa *charge trapping* pada komponen *floating gate* memori yang menguntungkan dalam kemajuan teknologi *memory non-volatile*. Oleh karena itu, dalam penelitian ini dilakukan studi mengenai silikon nitrida amorf ($a\text{-SiN}_x$) melalui metode simulasi dinamika molekuler. Simulasi dinamika molekuler ini dilakukan menggunakan program LAMMPS dengan menerapkan fungsi potensial *reactive force field* (ReaxFF) yang mampu memperhitungkan reaksi kimia berupa proses pemutusan dan pembentukan ikatan atom. Struktur $a\text{-Si}$ diperoleh melalui proses amorfisasi silikon kristal ($c\text{-Si}$) dengan menerapkan metode *melt-quech* pada temperatur titik lebur silikon kristal yakni 3500 K. Karakteristik struktur $a\text{-Si}$ yang diperoleh sesuai dengan penelitian sebelumnya yang dibuktikan dengan grafik distribusi radial (RDF). Proses nitrogenasi dilakukan dengan menyebarkan 900 atom N secara acak di atas permukaan $a\text{-Si}$ yang dilakukan selama 60 ps. Proses nitrogenasi menggunakan temperatur sistem yang bervariasi yakni 300 K, 600 K, 900 K, dan 1200 K dengan menerapkan ensemble NVT. Hasil proses nitrogenasi pada $a\text{-Si}$ menunjukkan semakin tinggi temperatur nitrogenasi yang diterapkan dalam sistem, maka semakin meningkat jumlah atom N yang berinteraksi pada struktur $a\text{-Si}$ dan menghasilkan distribusi kedalaman penetrasi atom N yang semakin dalam. Interaksi atom Si dan atom N ditandai dengan terbentuknya ikatan ionik diantara keduanya, hal ini diakibatkan oleh *transfer* elektron dari atom Si ke atom N. Interaksi kedua atom ini menyebabkan atom N menjadi lebih bermuatan negatif daripada atom Si.

MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION THE EFFECT OF TEMPERATURE VARIATIONS FOR NITROGENATION PROCESS OF AMORPHOUS SILICON

ABSTRACT

Amorphous silicon nitride ($a\text{-SiN}_x$) is one of the suitable material for building memory device. It is because $a\text{-SiN}_x$ have very high coordination defects structure. This defects is influencing the electronic and optical properties of this material. One of the example is charge trapping phenomenon in the floating gate component of memory that gives advantage to the advance of non-volatile memory technology. Therefore in this research the study about the nitrogenation process of amorphous silicon ($a\text{-Si}$) has been done through molecular dynamics simulation. This molecular dynamic simulations is performed by using LAMMPS program and applying a potential reactive force field function (ReaxFF) which capable to calculate the chemical reactions of the breaking and the formation process of an atomic bond. The $a\text{-Si}$ structure is obtained from the amorphous process of crystalline silicon ($c\text{-Si}$) by applying the melt-quench method at the melting point temperature of the crystalline silicon which is 3500 K. The characteristics of $a\text{-Si}$ structure obtained in accordance with the previous research and evidenced by the radial distribution graph (RDF). The nitrogenation process is carried out by spreading 900 N atoms randomly above the $a\text{-Si}$ surface for 60 ps. The nitrogenation process uses varying system temperatures of 300 K, 600 K, 900 K, and 1200 K by applying the NVT ensemble. The results of the nitrogenation process at $a\text{-Si}$ show the higher temperature applied in the system, the more number of N atoms interacting with the $a\text{-Si}$ structure and resulting in a deeper depth of N penetration. The interaction of Si and N atoms be marked by forming ionic bond between both atom, this is the effect of transfer electron from Si to N atoms. This both atoms interaction causes N atom become more negative than Si atom.

KATA PENGANTAR

Alhamdulillah puji syukur penulis panjatkan kepada Allah SWT atas rahmat, hidayah serta inayah-Nya kepada penulis, sholawat serta salam semoga tetap Allah curahkan kepada Nabi Muhammad *Shallallahu'alaihi wa sallam*, sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi berjudul “Simulasi Dinamika Molekular Pengaruh variasi temperatur terhadap proses nitrogenasi silikon amorf” sebagai salah satu syarat memperoleh gelar sarjana sains dalam bidang fisika di Universitas Brawijaya Malang.

Skripsi ini dapat terselesaikan dengan baik berdasarkan data yang diambil mulai bulan Juni hingga Desember 2016 dan tentunya didukung dengan berbagai referensi penunjang dari berbagai sumber lain. Penulis mengucapkan banyak terima kasih kepada pihak yang telah membantu, memberi dukungan serta terlibat dalam penelitian ini, kepada :

1. Kedua Orang tua tersayang (Titik Noerhayati dan Abd. Rohim) dan saudara kandung yang sangat penulis cintai (Maulida, Riska, dan Zilfania), terima kasih telah mendukung penulis dalam segala hal.
2. Bapak Mauludi Ariesto P, Ph.D dan ibu Istiroyah, S.Si., MT atas kesediaanya meluangkan waktunya selama proses pembimbingan dan selalu mendukung serta membimbing penulis dalam penyelesaian Tugas Akhir ini.
3. Bapak Prof.Dr. Muhammad Nurhuda, Rer.Nat selaku Ketua Jurusan Fisika Fakultas MIPA.
4. Seluruh dosen penguji, Bapak/Ibu Dosen, dan staff di Jurusan Fisika atas semua ilmu yang telah diajarkan semoga menjadi ilmu yang bermanfaat dunia akhirat.
5. Seluruh teman (Dina, Lutfi, Weni, Dessy) dan teman-teman Jurusan Fisika 2012 yang selama ini bersama dalam pelaksanaan penelitian pemodelan dan komputasi yang selalu mendukung penulis.
6. Suami penulis (Iwan Wijayanto) yang telah mendukung, membimbing dari awal hingga akhir penyelesaian tugas akhir ini.

7. Semua pihak yang tidak dapat penulis cantumkan satu persatu, yang telah membantu penelitian ini baik secara langsung maupun tidak langsung.

Penulis menyadari bahwa apa yang ditulis dalam skripsi ini masih banyak terdapat kekurangan maupun kesalahan. Saran dan kritik sangat penulis harapkan untuk memperbaiki kekurangan dalam skripsi ini, semoga laporan skripsi ini dapat memberikan manfaat bagi pembacanya.

Malang, 12 Juni 2017

Penulis

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
LEMBAR PENGESAHAN	v
LEMBARPERNYATAAN	vii
ABSTRAK	ix
ABSTRACT	xii
KATA PENGANTAR	xiii
DAFTAR ISI	xv
DAFTAR GAMBAR	xix
DAFTAR TABEL	xxi
BAB I : PENDAHULUAN	1
1.1. Latar Belakang	1
1.2. Rumusan Masalah	2
1.3. Batasan Masalah	2
1.4. Tujuan Penelitian	3
1.5. Manfaat Penelitian	3
BAB II : TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1. Simulasi Dinamika Molekular	5
2.1.1. Kondisi Batas	6
2.2. Ensemble.....	7
2.3 Fungsi Potensial	8
2.3.1. Fungsi Potensial ReaxFF.....	8
2.4. Perangkat Simulasi Dinamika Molekular	9
2.4.1. Simulator LAMMPS	9
2.4.2. Perangkat Visualisasi OVITO	10

2.4.3. Perangkat AtomEye	11
2.5. Unsur Silikon (Si).....	12
2.6. Unsur Nitrogen (N)	14
BAB III : METODE PENELITIAN	17
3.1. Waktu dan Tempat pelaksanaan.....	17
3.2. Rancangan Penelitian	17
3.2.1. Amorfisasi Silikon Kristal	19
3.2.2. Nitrogenasi Silikon Amorf	20
3.3. Analisa Data	20
3.3.1. Pengolahan data hasil amorfisasi silikon kristal ...	21
3.3.2. Pengolahan data hasil nitrogenasi silikon amorf ..	22
BAB IV : HASIL DAN PEMBAHASAN.....	23
4.1. Amorfisasi Silikon Kristal.....	23
4.1.1. Proses pemansan (<i>melting</i>)	23
4.1.2. Proses pendinginan (<i>quenching</i>).....	24
4.2. Nitrogenasi Silikon Amorf (a-Si)	25
4.2.1. Pengaruh temperatur nitrogenasi terhadap jumlah dan distribusi kedalaman	26
4.2.2. Analisa jumlah ikatan <i>n-fold</i> atom N pada proses nitrogenasi a-Si.....	31
4.2.3. Analisa atom dalam struktur silikon nitrida amorf dengan menggunakan peta warna.....	34
BAB V : PENUTUP.....	39
5.1. Kesimpulan.....	39
5.2. Saran.....	39
DAFTAR PUSTAKA	41

LAMPIRAN	45
Lampiran 1 : <i>Script input</i> proses amorfisasi c-Si.....	45
Lampiran 2 : <i>Script input</i> proses Nitrogenasi a-Si.....	49
Lampiran 3 : <i>Read_data</i> atom N.....	51
Lampiran 4 : Data grafik RDF.....	53
Lampiran 5 : Data hasil dan pembahasan.....	56
Lampiran 5 : Tampilan Perangkat Visualisasi.....	58

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Kondisi Batas Periodik, PBC	7
Gambar 2.2 Program Visualisasi OVITO	11
Gambar 2.3 Struktur Silikon Kristal Tunggal	13
Gambar 2.4 Struktur Geometris Silikon Amorf (a) <i>Dangling bond</i> (b) dan (c) <i>floating bond site</i>	13
Gambar 3.1 Diagram alur penelitian	18
Gambar 3.2 Bagan Alur Proses Amorfisasi c-Si	19
Gambar 3.3 Kondisi Awal proses Nitrogenasi a-Si.....	20
Gambar 3.4 (a) Struktur c-Si sebelum diamorfisasi (b) Struktur a-Si setelah proses amorfisasi	21
Gambar 3.5 Hasil Nitrogenasi Berupa Silikon Nitrida Amorf (a- SiN _x).....	22
Gambar 4.1 Grafik Fungsi Distribusi Radial (RDF) pada Proses <i>melting</i> dan Kondisi ekuilibrium	24
Gambar 4.2 Grafik Fungsi Distribusi Radial (RDF) pada Proses <i>quenching</i> , <i>melting</i> dan ekuilibrium	25
Gambar 4.3 Pengaruh Temperatur Nitrogenasi a-Si terhadap Jumlah Atom N berdasarkan Fungsi Waktu.....	26
Gambar 4.4 Distribusi Jumlah Atom N pada Kedalaman Tertentu..	29
Gambar 4.5 Fraksi Jumlah atom N pada Proses Nitrogenasi Silikon amorf selama 20 ps	30
Gambar 4.6 Jumlah Ikatan n-fold atom Si setelah dinitrogenasi.....	31
Gambar 4.7 Jumlah Ikatan n-fold atom N setelah dinitrogenasi	32

Gambar 4.8 Grafik Fungsi Distribusi Radial Si-N setelah proses Nitrogenasi	33
Gambar 4.9 Peta Warna Permukaan a-SiN _x (300 K). (a) Tipe Atom, (b) muatan atom, (c) <i>coordination number</i> atom	34
Gambar 4.10 Peta Warna Permukaan a-SiN _x (600 K). (a) Tipe Atom, (b) muatan atom, (c) <i>coordination number</i> atom	35
Gambar 4.11 Peta Warna Permukaan a-SiN _x (900 K). (a) Tipe Atom, (b) muatan atom, (c) <i>coordination number</i> atom	36
Gambar 4.12 Peta Warna Permukaan a-SiN _x pada temperatur (1200 K). (a) Tipe Atom, (b) muatan atom, (c) <i>coordination number</i> atom	37

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Sifat Mekanis dan Termal dari Silikon (www.rsc.org)	12
Tabel 2.2 Sifat Mekanis dan Termal dari Nitrogen (www.rsc.org)..	14
Tabel 4.1 Jumlah Atom N yang Terdistribusi dalam Struktur Silikon Amorf selama 20 <i>ps</i>	28