

# Pengaruh Doping Atom Galium (Ga) dan Arsenik (As) terhadap Sifat Optik Linier dari Silicene dengan Pendekatan Teori Fungsi Kerapatan

Mauludi Ariesto Pamungkas, Abdurrouf, Dessy Anggraeni Setyowati

Jurusan Fisika FMIPA Universitas Brawijaya

## ABSTRAK

Perkembangan teknologi pada zaman ini dapat ditandai dengan adanya berbagai inovasi perangkat elektronik yang serba canggih, salah misalnya transistor, superkapasitor, fotodiode dan chip. Namun, dengan seiring berkembangnya teknologi yang pesat, dibutuhkan suatu material baru yang berukuran lebih kecil, ringan dan bersifat *portable*. Para eksperimentalis berusaha untuk mengeksplorasi bahan dua dimensi (2D) lainnya yang memiliki kisi *honeycomb*. Diantara yaitu silicene yang mirip dengan graphene dan memiliki sifat unggul. Silicene merupakan bentuk dua dimensi (2D) dari silikon yang memiliki struktur seperti sarang lebah (*honeycomb*). Dalam penelitian ini digunakan doping galium, arsenik dan galium arsenik dengan posisi *bridge*, *hollow*, dan *top* untuk mengetahui pengaruh posisi doping terhadap sifat optik linier dari silicene murni. Metode yang dilakukan dengan menggunakan pendekatan teori fungsi kerapatan. *Software* yang digunakan adalah abinit 7.02. Sifat optik yang diteliti antara lain indek bias, koefisien pemantulan, dan koefisien penyerapan. Doping galium, arsenik, dan galium arsenik mempengaruhi sifat optik linier dari silicene. Silicene murni yang didoping dengan galium, arsenik, dan galium arsenik menyebabkan nilai dari sifat optik linier mengalami penurunan pada semua posisi.

**Kata Kunci :** Silicene, Galium, Arsenik, Sifat Optik Linier, Teori Fungsi Kerapatan

## I. Pendahuluan

Akhir-akhir ini graphene diteliti oleh banyak peneliti karena memiliki sifat-sifat yang unik (Nair dkk., 2008). Graphene dengan sifat-sifatnya yang kuat, elastis, memiliki konduktivitas tinggi dan memiliki kemampuan untuk berubah sifat dari metal atau semi metal menjadi semikonduktor dan sebaliknya (Efetov dkk., 2010). Penggunaan graphene memberikan prospek bagus untuk aplikasi masa depan dalam perangkat nanoelektronik (Novoselov dkk, 2004).

Para eksperimentalis berusaha untuk mengeksplorasi bahan dua dimensi (2D) lainnya dengan kisi *honeycomb*. Diantara yaitu silicene yang mirip dengan graphene dan memiliki sifat unggul (Xu, 2013). Silicene merupakan bentuk dua dimensi (2D) dari Silikon yang memiliki struktur seperti sarang lebah (*honeycomb*). Silicene mulai diteliti lebih lanjut mulai tahun 2012 (Vogt dkk., 2012). Kestabilan dan sifat silicene mirip dengan graphene, perbedaan secara teoritis pada silicene yaitu cenderung untuk membentuk ikatan  $sp^3$  sedangkan graphene cenderung untuk

membentuk ikatan  $sp^2$  (Durgun dkk., 2005). Kekurangan graphene yaitu tidak memiliki *bandgap* dan interaksi spin-orbital yang kecil. Kekurangan ini telah dilengkapi dengan adanya penelitian tentang bahan monolayer dua dimensi (2D) seperti silicene, h-BN, dan Boron layer yang telah disintesis (Lebègue dan Eriksson, 2009).

Galium termasuk golongan IIIA dan sesuai dengan penelitian yang telah dilakukan bahwa konduktivitas optik galium menunjukkan ketajaman di daerah energi sekitar 1-3 dan 2-3 eV dengan penurunan tetap terhadap energi yang lebih tinggi (Saleh dan Teich, 1991). Doping galium dan arsenik menjadi peranan penting dalam perkembangan semikonduktor. Alasan diberikan doping atom galium dan arsenik pada silicene karena atom galium mempunyai 3 elektron valensi dan sering digunakan untuk doping pada semikonduktor tipe-p dimana mayoritas pembawa muatannya adalah hole. Untuk doping arsenik disebabkan karena atom arsenik memiliki 5 elektron

valensi, yang sering digunakan untuk doping pada semikonduktor tipe-n. Semikonduktor tipe-n, mayoritas pembawa muatannya adalah elektron (Kittle, 1960).

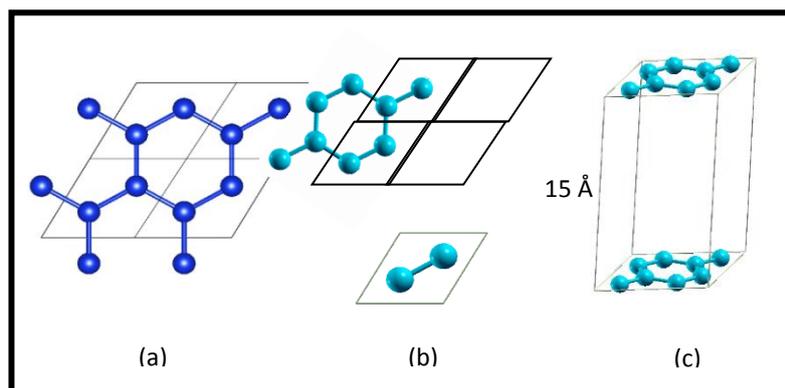
Galium Arsenik (GaAs) merupakan perangkat yang paling penting dalam bidang optoelektronik karena menjadi dasar perangkat elektronik. Selain itu, galium arsenik juga mempunyai kisi yang sama konstan (Saleh dan Teich, 1991). Galium Arsenik merupakan semikonduktor biner, yang dibentuk dengan menggabungkan elemen kelompok III (Boron, Aluminium, Galium) dan V (Nitrid, Fosfat, Arsenik). Semikonduktor biner ini digunakan untuk membuat detektor foton dan sumber (dioda pemancar cahaya dan laser) (Václavík dan Vápenka, 2013).

## II. Metodologi Komputasi

Untuk mengetahui pengaruh doping adatom dari galium (Ga) dan arsenik (As) pada silicene dengan menggunakan teori fungsi kerapatan (*Density Functional Theory*) dengan software Abinit 7.02. Fungsi *exchange-correlation* dengan menggunakan *Gradient Approximation Perdew Bucke Erzhenhof* (GGA-PBE).

Struktur dan sifat optik kristal dalam metode komputasi dapat dihitung secara langsung dengan persamaan Schrödinger, di dalam pemodelan struktur dan sifat optik menggunakan abinit karena dalam *software* abinit *variable* yang dibutuhkan untuk mengetahui struktur dan sifat kristal sudah lengkap. Sedangkan pendekatan yang digunakan menggunakan teori fungsi kerapatan, dikarenakan memberikan keseimbangan antara rumus dan kerumitan perhitungan (Gygi dan Giulia, 2005). Dengan menggunakan teori fungsi kerapatan diharapkan dapat digunakan untuk mengetahui pengaruh doping atom galium dan arsenik terhadap sifat linier optik silicene murni.

Basis set *planewave* dengan energi *cutoff* 30 Hartree. Jumlah k-point dari *Brillouin-Zone* menggunakan  $20 \times 20 \times 1$ , dan banyaknya iterasi (nstep) yang digunakan yaitu sebanyak 30 iterasi. Teknik pemilihan sel dapat ditunjukkan pada **Gambar 2.1** sedangkan untuk alur penelitian ditunjukkan pada **Gambar 2.2**



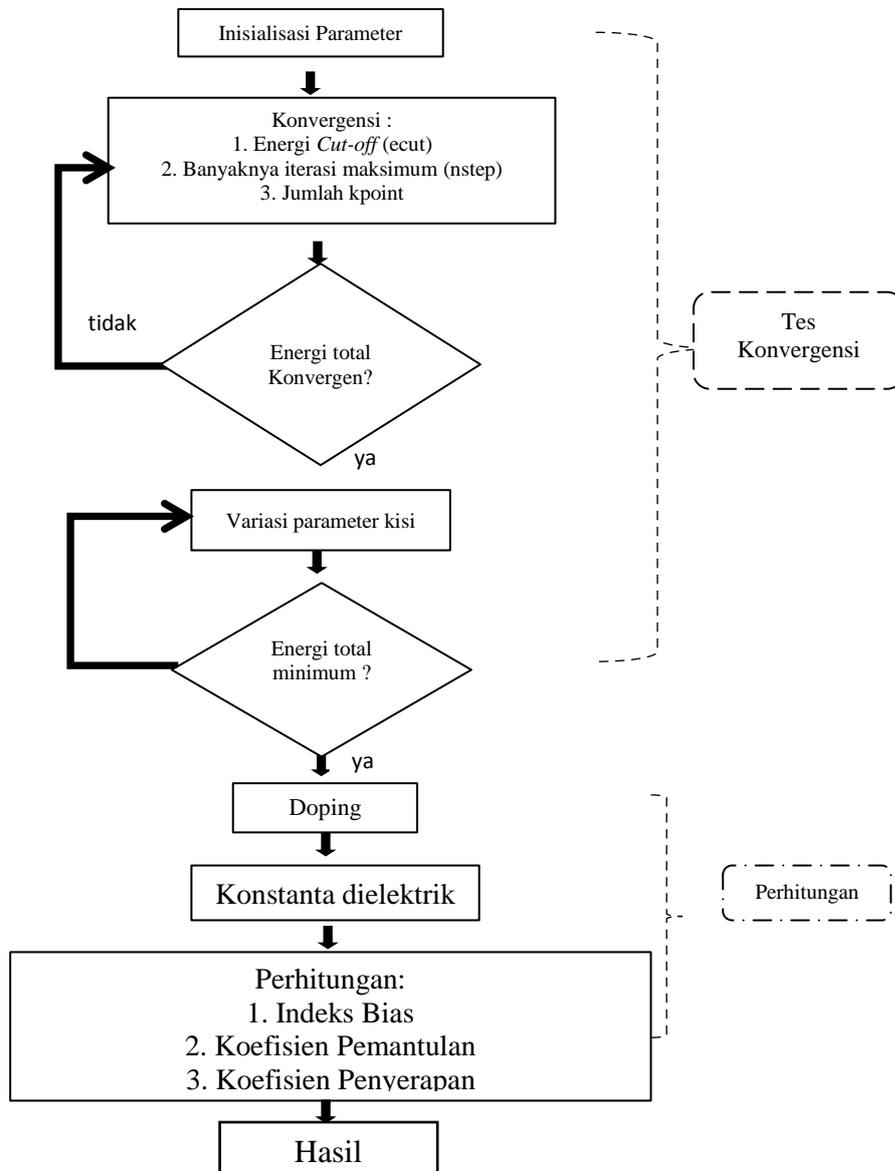
**Gambar 2.1** (a) Teknik pemilihan supersel (b) supersel  $2 \times 2$  dan unit sel (c) sumbu z sel 15 angstrom.

Pada penelitian ini, posisi dopingnya menggunakan 3 posisi yaitu *bridge*, *hollow*, dan *top*.

Posisi *bridge* yaitu atom doping diletakkan di antara kedua atom silikon.

Posisi *hollow* yaitu atom diletakkan di tengah-tengah struktur heksagonal silicene.

Posisi *top* yaitu atom diletakkan di atas salah satu atom silicene.



**Gambar 2.2** Diagram Alir Penelitian

### III. HASIL DAN PEMBAHASAN

Kestabilan struktur pada silicene dapat diketahui melalui perhitungan energi kohesive. Perhitungan energi kohesive yaitu Energi kohesive untuk silicene murni

$$E_{\text{cohesive}} = E_{\text{silikon}} - \left( \frac{E_{\text{silicene}}}{8} \right) \quad (3.1)$$

Energi kohesive untuk silicene murni didoping Galium (Ga) atau Arsenik (As)

$$E_{\text{cohesive}} = E_{\text{silikon}} - (E_{\text{silicene}} + E_{\text{adatom}}) \quad (3.2)$$

**Tabel 3.1** Hasil perhitungan energi kohesive

Doping		Energi Cohesive (Ha)
Silicene murni		4,33
Si-Ga	B	-1,25
	H	-1,63
	T	-0,70
Si-As	B	-1,08
	H	-1,28
	T	-1,45

**Tabel 3.1** menunjukkan bahwa energi kohesive paling rendah untuk adatom galium adalah pada posisi *hollow*, dan untuk adatom arsenik pada posisi *top*. Untuk penggabungan dua atom, maka posisinya adalah *hollow* untuk adatom galium dan *top* untuk adatom arsenik.

Sifat optik yang diamati dan dihitung antara lain indeks bias, koefisien pemantulan dan koefisien penyerapan. Rumus untuk menyatakan sifat-sifat optik tersebut antara lain

$$\text{Indeks bias real (n)} = \left( \frac{\sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} + \varepsilon_1}{2} \right)^{1/2} \quad (3.3)$$

$$\text{Indeks bias imajiner (k)} = \left( \frac{\sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} - \varepsilon_1}{2} \right)^{1/2} \quad (3.4)$$

$$\text{Koefisien pemantulan (R)} = \left( \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \right)^{1/2} \quad (3.5)$$

$$\text{Koefisien penyerapan } (\alpha) = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (3.6)$$

Keterangan :

$\varepsilon_1$  = konstanta dielektrik real

$\varepsilon_2$  = konstanta dielektrik imajine

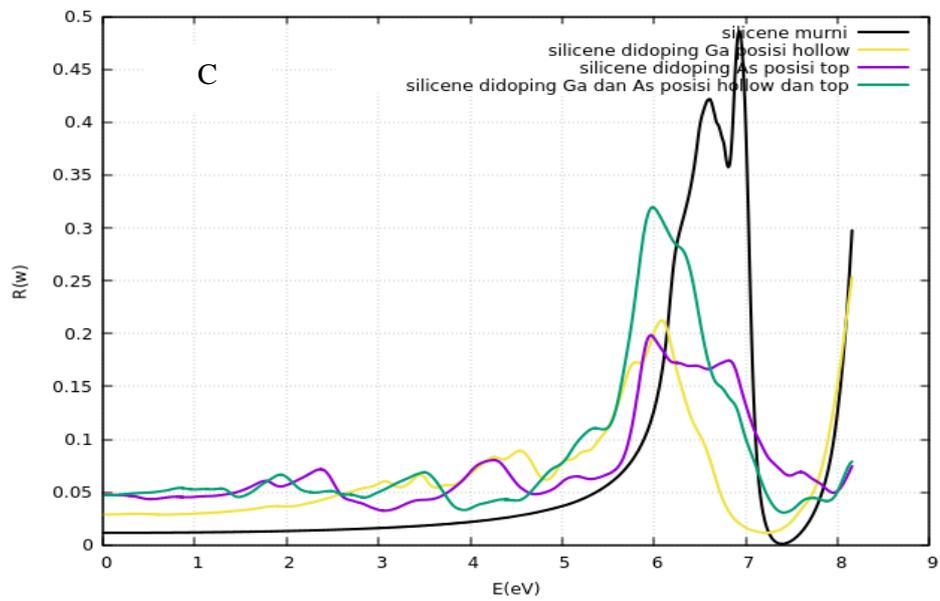
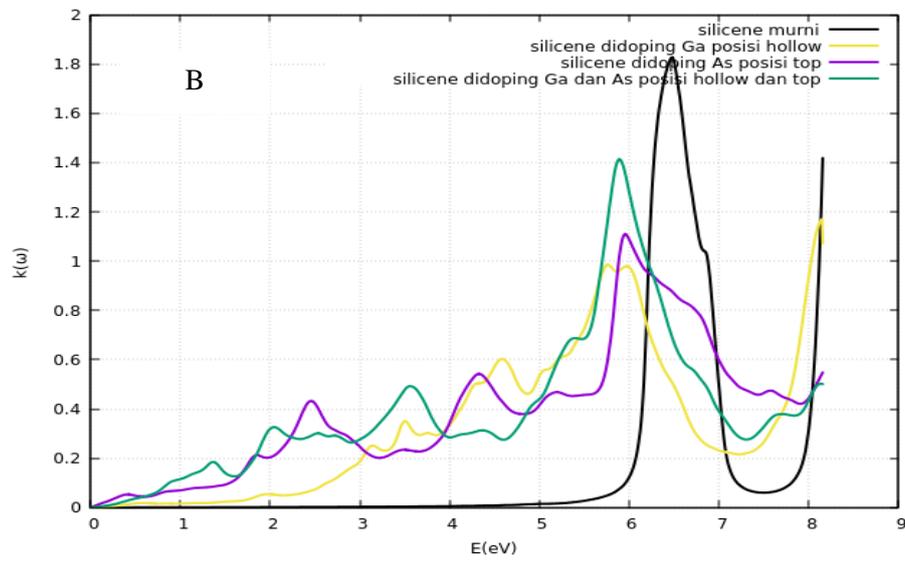
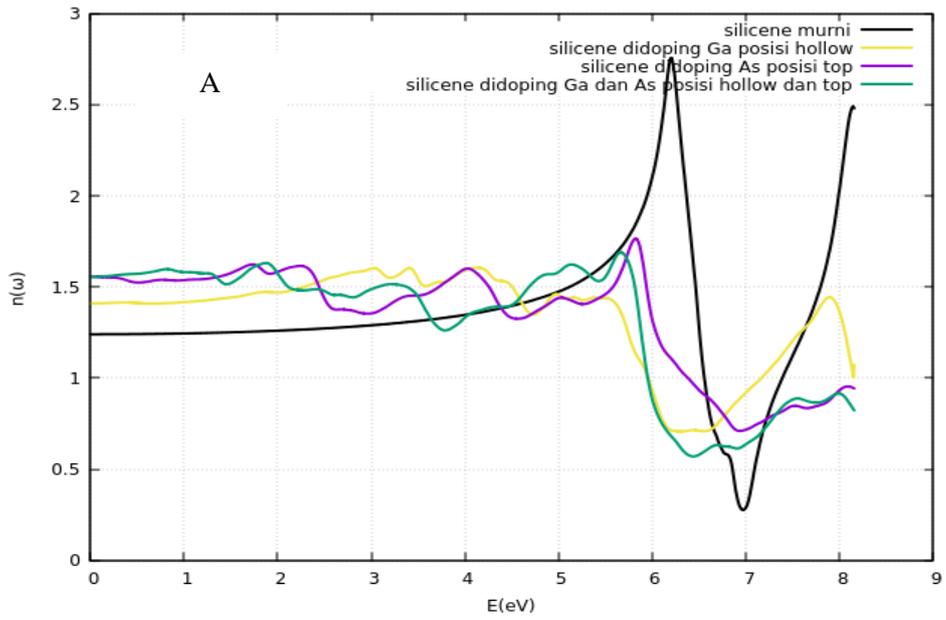
$\pi$  = phi (3,14 atau 22/7)

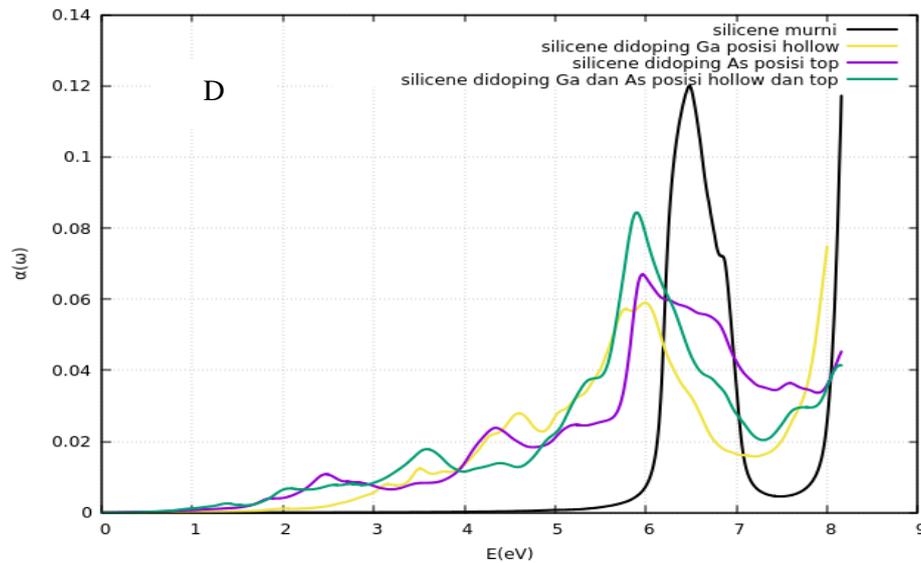
$\lambda$  = panjang gelombang (Angstrom)

Gambar A menunjukkan Gambar indeks bias real antara silicene murni dengan silicene yang didoping. Gambar A menunjukkan hubungan antara energi (eV) pada sumbu x dengan nilai indeks bias real pada sumbu y. Silicene murni memiliki puncak maksimum paling tinggi dibandingkan dengan silicene yang didoping, hal ini menunjukkan bahwa ketika didoping nilai indeks bias silicene mengalami penurunan.

Gambar B menunjukkan hubungan antara energy (eV) pada sumbu x dengan nilai indeks bias imajiner pada posisi y. Gambar B menunjukkan bahwa silicene yang didoping akan mengalami penurunan dibandingkan dengan silicene yang belum didoping. Penurunan ini menunjukkan bahwa daya serap semakin menurun. Gambar C menunjukkan antara energi (eV) dengan nilai koefisien pemantulan. Berdasarkan Gambar C menunjukkan bahwa nilai koefisien mengalami penurunan ketika didoping dibandingkan dengan silicene murni. Penurunan yang terjadi menunjukkan bahwa daya pantulnya semakin menurun.

Gambar D menunjukkan antara energi (eV) dengan nilai koefisien penyerapan. Berdasarkan Gambar D menunjukkan bahwa nilai koefisien penyerapan mengalami penurunan ketika didoping dibandingkan dengan silicene murni. Penurunan yang terjadi menunjukkan bahwa daya serap menurun.





Keterangan : Gambar A (Indeks bias real), Gambar B (Indeks bias imajiner), Gambar C (Koefisien Pemantulan, dan Gambar D (Koefisien Penyerapan)

#### IV. KESIMPULAN

Silicene murni yang didopping dengan galium menunjukkan bahwa nilai indeks bias real dan koefisien penyerapan paling rendah berada pada posisi *hollow*, nilai indeks bias imajiner paling rendah berada pada posisi *top*, nilai koefisien pemantulan paling rendah pada saat silicene murni didoping atom galium pada posisi *bridge*. Ketika silicene murni di doping dengan Arsenik, maka nilai indeks bias real dan koefisien pemantulan paling rendah berada pada posisi *top*, nilai indeks bias

imajiner dan koefisien penyerapan paling rendah pada posisi *hollow*. Silicene yang didoping dengan dua atom (galium arsenik), nilai dari semua sifat optik yaitu indeks bias real, indeks bias imajiner, koefisien pemantulan, dan koefisien penyerapan mengalami penurunan jika dibandingkan dengan silicene murni.

#### V. DAFTAR PUSTAKA

- Nair, R. R., Blake, P., Grigorenko, N., Novoselov, K. S., Booth, T. J., Stauber, T., dan Geim, a. K. 2008. Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene. *Brevia*, 320(June), 2008. <https://doi.org/10.1126/science.1156965>
- Liu, G., Liu, S. B., Xu, B., Ouyang, C. Y., dan Song, H. Y. 2015. First-principles study of the stability of free-standing germanene in oxygen atmosphere. *Journal of Applied Physics*, 118(12). <https://doi.org/10.1063/1.4931057>
- Vogt, P., Padova, P. De, Quaresima, C., Avila, J., Frantzeskakis, E., Lay, G. Le., dan Resta, A. 2012. Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon. *Physical Review Letters*, 155501(April), 1–5. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.155501>
- Durgun, E., Tongay, S., dan Ciraci, S. 2005. Silicon and III-V compound nanotubes: Structural and electronic properties. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 72(7), 1–10. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.075420>
- Lebègue, S., dan Eriksson, O. 2009. Electronic structure of two-dimensional crystals from ab initio theory. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 79(11), 4–7. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.115409>
- Saleh, B. E. A., dan Teich, M. C. 1991. Photons in Semiconductors. In *Fundamentals of Photonics* (Vol. 5, pp. 542–591). <https://doi.org/10.1002/0471213748.ch15>
- Kittel, C. 2005. *Introduction to solid state physics*. (P. McEuen, Ed.) (8th ed., Vol. Third). California: John Wiley and Sons, Inc
- Václavík, J., dan Vápenka, D. 2013. Galium Phosphide as a material for visible and infrared optics. *EPJ Web of Conferences*, 48, 1–4. <https://doi.org/10.1051/epjconf/20134800028>