

## **BAB III**

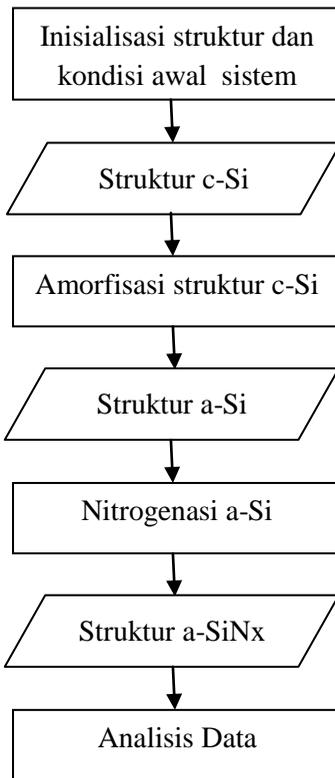
### **METODE PENELITIAN**

#### **3.1. Waktu dan Tempat Pelaksanaan**

Penelitian ini dilaksanakan dari bulan April 2016 sampai bulan Desember 2016 di Laboratorium Simulasidan Pemodelan Jurusan Fisika Fakultas MIPA Universitas Brawijaya Malang.

#### **3.2. Rancangan Penelitian**

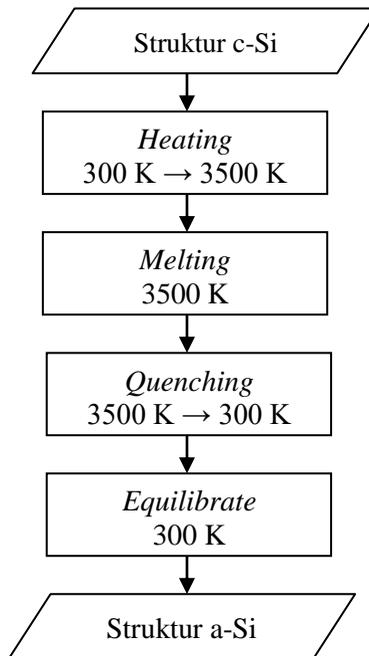
Penelitian Simulasi dinamika molekuler ini dilakukan dengan jenis sistem operasi berbasis Linux (Ubuntu) untuk menjalankan program utamanya yakni program LAMMPS (Plimpton, 1995), program Ovito yang digunakan untuk memvisualisasikan simulasi, dan program AtomEye yang digunakan untuk menganalisis hasil data simulasi. Jenis fungsi potensial yang digunakan dalam program LAMMPS adalah fungsi potensial ReaxFF. Secara umum penelitian ini dibagi menjadi dua tahap. Tahap pertama yakni proses amorfisasi silikon kristal agar diperoleh struktur silikon amorf, kemudian dilanjutkan dengan tahap kedua yakni proses nitrogenasi silikon amorf yang diperoleh dari tahap pertama dengan menerapkan beberapa variasi temperatur yakni temperatur 300 K, 600 K, 900 K dan 1200 K. Hasil dari tahap kedua berupa struktur silikon nitrida amorf yang kemudian dianalisa. Bagan alur kerangka penelitian secara garis besar diberikan oleh gambar 3.1.



Gambar 3.1 Diagram alur penelitian

Inisialisasi struktur pada sistem merupakan tahap penentuan kode program *input* yang digunakan untuk menentukan ukuran kotak simulasi, struktur awal atom, temperatur awal sistem, serta model fungsi potensial yang akan dipakai dalam tahap awal proses simulasi. Kotak simulasi pada simulasi ini menerapkan batas *boundary* campuran, untuk sumbu-*x* dan sumbu-*y* memakai *periodic boundary condition* (PBC), sedangkan untuk sumbu-*z* memakai *isolated boundary condition* (IBC) dengan ukuran kotak simulasi sebesar 38.4 Å, 38.4 Å, dan 76.0 Å. Struktur awal sistem ini dilakukan pada struktur kristal silikon yang memiliki *lattice constant* sebesar 5.4307 Å.

### 3.2.1. Amorfisasi Silikon kristal

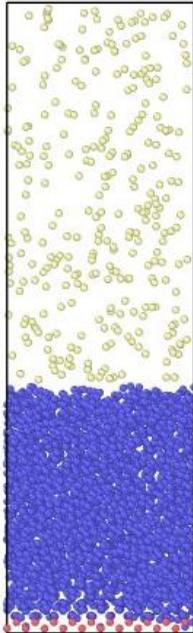


Gambar 3. 2 Bagan alur proses amorfisasi c-Si

Proses amorfisasi c-Si yang dilakukan dalam simulasi pada penelitian ini menggunakan metode *melt-quench*. Metode ini merupakan salah satu metode untuk mendapatkan hasil struktur amorf dari c-Si. Metode ini diterapkan dengan memanaskan (*heating*) struktur c-Si dari temperatur ruang hingga mencapai titik leburnya (*melting*) yakni 3500 K, yang dilakukan dengan menerapkan *velocity rescaling* selama 10 ps ( $400000 \Delta t$ ) hingga mencapai titik leburnya kemudian membiarkan sistem selama 1 ps ( $40000 \Delta t$ ) dengan menerapkan ensemble *NVT*. Dilanjutkan dengan proses pendinginan (*quenching*) hingga kembali pada temperatur ruang sebesar 300 K. Proses *quenching* dilakukan dengan *cooling rate* yang tinggi yakni sebesar  $2,13 \times 10^{15}$  K/s selama 1.5 ps ( $60000 \Delta t$ ) dengan menerapkan ensemble *NVT*. Kemudian sistem dibiarkan pada tahap *equilibrate* selama 4 ps ( $140000 \Delta t$ ) hingga fase a-Si stabil.

### 3.2.2. Nitrogenasi Silikon Amorf

Ketika proses Amorfisasi c-Si selesai dan menghasilkan material a-Si, maka hasil amorf silikon ini akan dilanjutkan pada proses Nitrogenasi dengan menyebarkan secara acak atom Nitrogen di atas permukaan a-Si sebanyak 300 atom yang dilakukan bertahap hingga tiga kali proses seperti yang ditunjukkan pada gambar 3.3, sehingga total keseluruhan atom nitrogen yang diberikan adalah 900 atom. Tahap nitrogenasi ini dilakukan selama 20 ps ( $400000\Delta t$ ) dengan *timestep*  $\Delta t = 0,05$  fs.



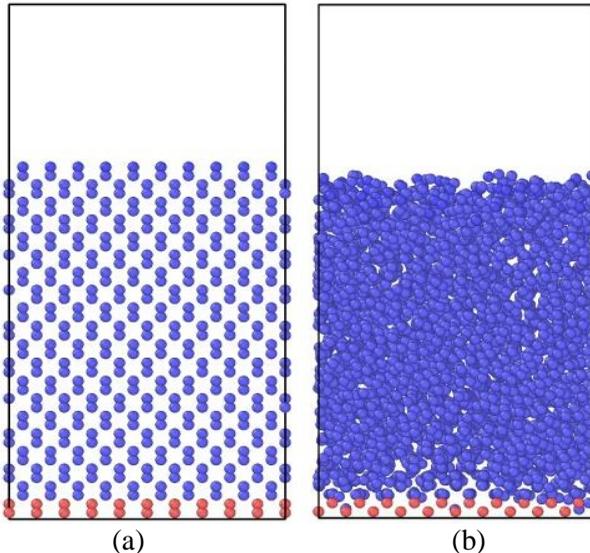
Gambar 3.3 Kondisi awal proses Nitrogenasi a-Si

### 3.3. Analisis Data (*Post Processing*)

Data utama yang didapatkan dari proses amorfisasi c-Si dan nitrogenasi a-Si adalah berupa koordinat atom-atom yang ada dalam sistem, RDF (*radial distribution function*), ikatan antar atom, dan besar muatan setiap atom dalam simulasi. Data ikatan antar atom dan besar muatan setiap atom diperoleh dari model fungsi potensial

ReaxFF yang telah diterapkan pada simulasi. Analisis terhadap data-data yang diperoleh tersebut dapat diinterpretasikan sebagai grafik fungsi distribusi radial ( $g(r)$ ) serta karakteristik ikatan  $n$ -fold antar atom. Proses olah data dilakukan dengan bantuan kode program c++ dan Microsoft Office Excel.

### 3.3.1. Pengolahan data hasil amorfisasi silikon kristal

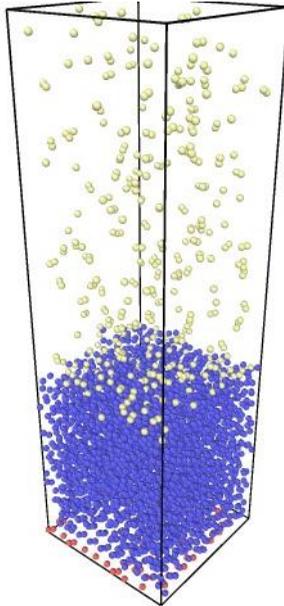


Gambar 3.4 (a) Struktur Silikon kristal sebelum proses amorfisasi  
(b) Struktur Silikon amorf setelah proses amorfisasi.

Kondisi awal simulasi yang dilakukan pada penelitian ini dapat dilihat dari Gambar 3.4 (a). Pada gambar 3.4 (a) terlihat kotak simulasi yang berisikan atom-atom silikon tersusun secara teratur membentuk struktur kristal, dengan lapisan bawah yang diberi perlakuan *fix* untuk membuat lapisan bawah struktur c-Si tidak berpindah (ditunjukkan dengan warna merah). Kemudian Gambar 3.4 (b) memperlihatkan kondisi ketika proses amorfisasi selesai dilakukan, terlihat atom-atom silikon yang sebelumnya berikatan teratur dalam bentuk kristal berubah menjadi bentuk yang tidak teratur atau biasa disebut amorf. Data yang diperoleh dari proses amorfisasi ini berupa fungsi distribusi radial ( $g(r)$ ) yang dapat diplot

dalam bentuk grafik RDF agar hasil penelitian yang dilakukan ini dapat dibandingkan dengan hasil penelitian lain.

### 3.3.2. Pengolahan data hasil nitrogenasi silikon amorf



Gambar 3.5 Hasil nitrogenasi berupa silikon nitrida amorf ( $a\text{-SiN}_x$ )

Gambar 3.5 diatas merupakan bagian dari simulasi yang akan dianalisis. Analisis data hasil nitrogenasi a-Si adalah berupa data-data koordinat atom yang akan diolah menjadi beberapa analisa hasil yakni jumlah atom N yang berikatan dengan Si, kedalaman penetrasi atom N, pengaruh temperatur terhadap hasil nitrogenasi, dan analisis ikatan *n-fold* atom-atom a-SiNx dalam sistem.