

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



Dessy Anggraeni Setyowati  
135090301111023

**PEMBIMBING I**

Mauludi Ariesto Pamungkas, S.Si., M.Si., Ph.D

**PEMBIMBING II**

Dr. rer.nat. Abdurrouf S.Si., M.Si.

**PENGUJI**

Prof. Dr. rer.nat. Muhammad Nurhuda

# Outline



1

**PENDAHULUAN**

2

**TINJAUAN PUSTAKA**

3

**METODOLOGI**

4

**HASIL & PEMBAHASAN**

5

**PENUTUP**

# PENDAHULUAN

## LATAR BELAKANG



Karbon

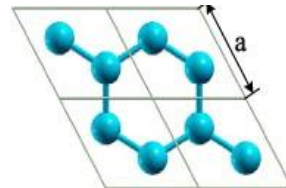


Graphene

Interaksi spin orbital kecil



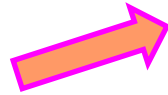
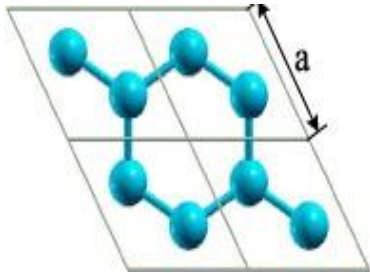
Silikon



Silicene

Dikembangkan mulai tahun 2012

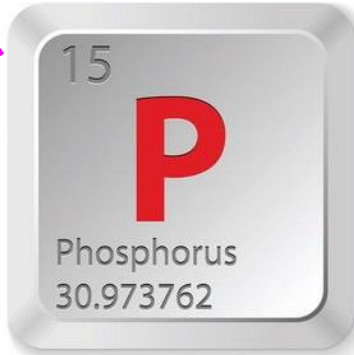
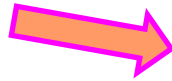
Interaksi spin orbital besar



doping

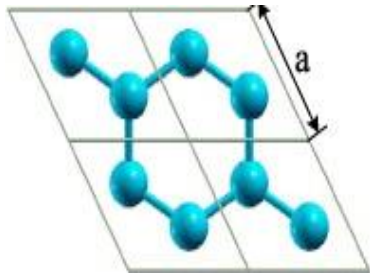


**Silicene**

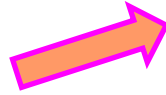


Telah dilakukan penelitian silicen didoping dengan Al dan P dengan menggunakan nanoset silicene berbentuk buckled (Das dkk, 2015).

# PENDAHULUAN



**Silicene**



**Gallium**

Memiliki 3 elektron valensi

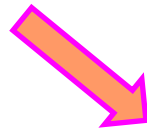
Doping semikonduktor tipe-p



**Arsenic**

Memiliki 5 elektron valensi

Doping semikonduktor tipe-n



**Gallium**



**Arsenic**

Semikonduktor yang berpasangan (Vaclavik, 2013)

Punya kisi yang sama (Saleh, 1991).

## RUMUSAN MASALAH

Bagaimana sifat optik linier dari silicene dengan pendekatan teori fungsi kerapatan?

Bagaimana pengaruh doping atom Gallium (Ga) dan Arsenic(As) terhadap sifat optik linier dari silicene dengan pendekatan teori fungsi kerapatan?

## BATASAN MASALAH

Struktur silicene yang digunakan hanya sel 2x2

Sifat optik yang dianalisa dan disimulasikan dibatasi pada indeks bias, koefisien pemantulan, dan koefisien penyerapan

## TUJUAN PENELITIAN

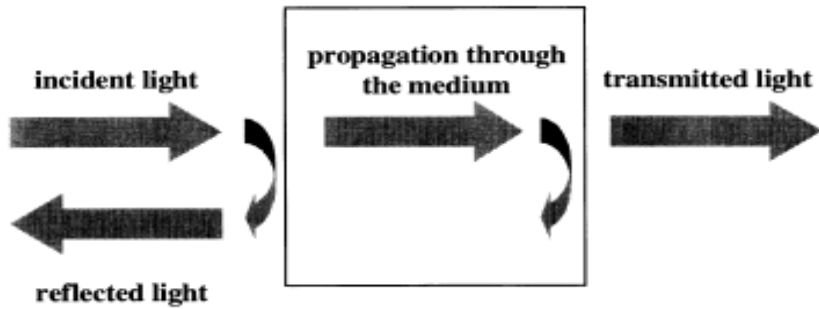
1. Mengetahui sifat optik linier dari silicene dengan pendekatan teori fungsi kerapatan.
2. Mengetahui pengaruh doping atom Gallium (Ga) dan Arsenic (As) terhadap sifat optik linier dari Silicene dengan pendekatan teori fungsi kerapatan.

## MANFAAT PENELITIAN

Diharapkan mampu memberi arahan kepada eksperimentalis sebagai pembanding dalam mendesain struktur material di laboratorium

# TINJAUAN PUSTAKA

## Sifat optik



Keterangan :

$\varepsilon$  = konstanta dielektrik

$n$  = indeks bias real,

$k$  = indeks bias imajiner (koef extinction)

$\lambda$  = panjang gelombang (Angstrom)

Fox, 2011

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

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

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

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



# Teori Fungsi Kerapatan

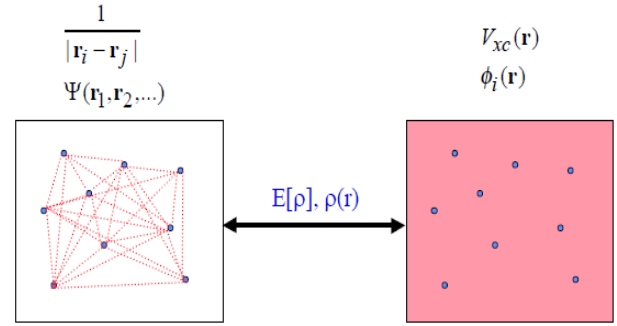
Dengan menggunakan persamaan Kohn Sham

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{XC}(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r})$$

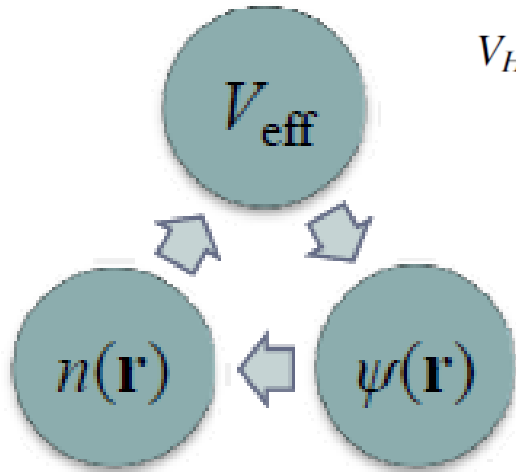
$V(\mathbf{r})$  = Interaksi antara satu elektron dengan kumpulan inti atom

$$V_H(\mathbf{r}) = e^2 \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r' = \text{Interaksi dengan densitas elektron}$$

$V_{XC}(\mathbf{r})$  = potensial exchange correlation



# Teori Fungsi Kerapatan

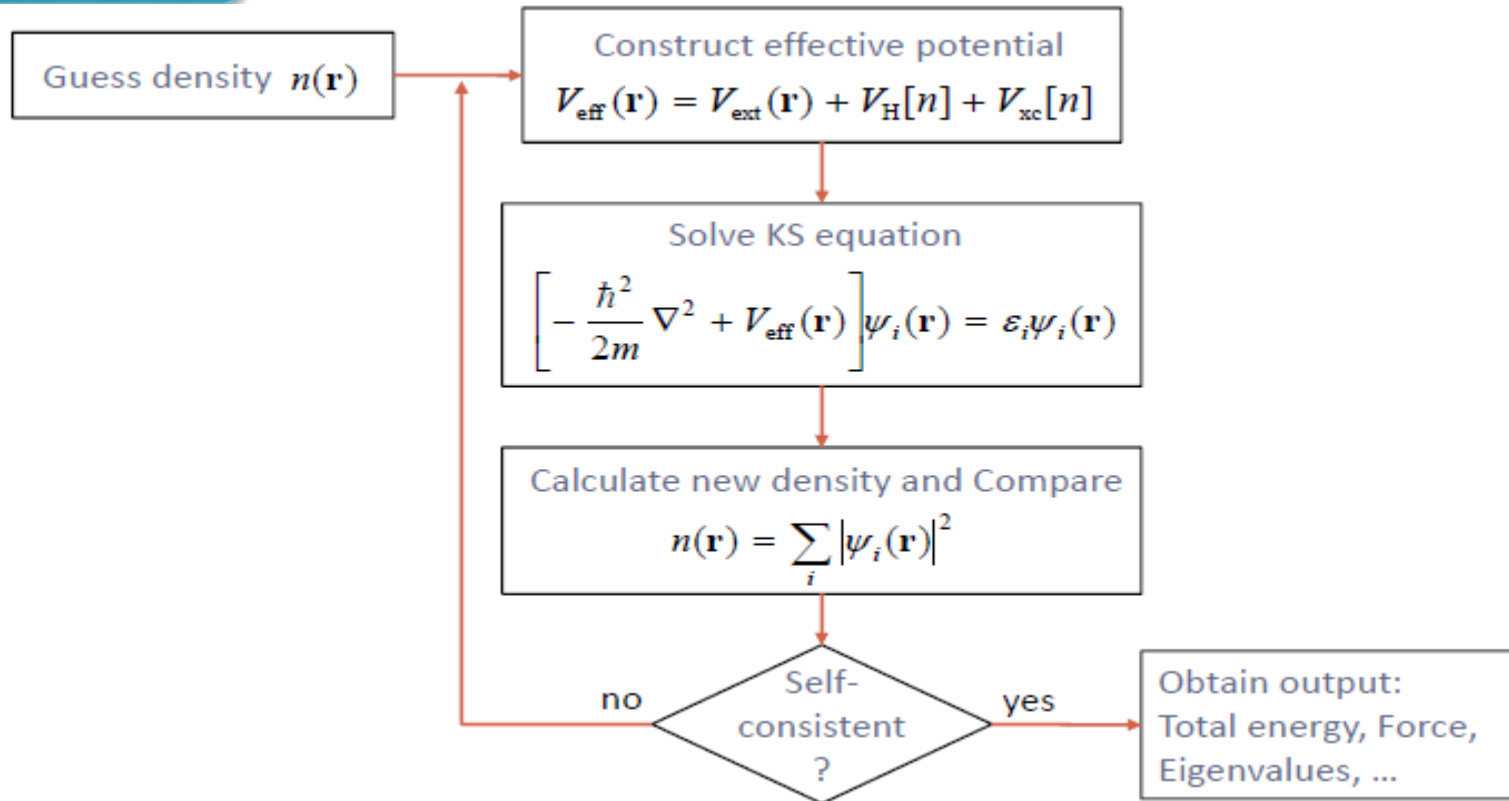


$$V_H(\mathbf{r}) = e^2 \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r'$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r})$$

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{\text{xc}}(\mathbf{r})$$

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2$$



# METODOLOGI

## Waktu & Tempat

20 Januari 2017 s.d. 20 Juni 2017

## Tempat Pelaksanaan

Laboratorium Komputasi dan  
Pemodelan gedung Biomol  
urusan Fisika FMIPA-UB



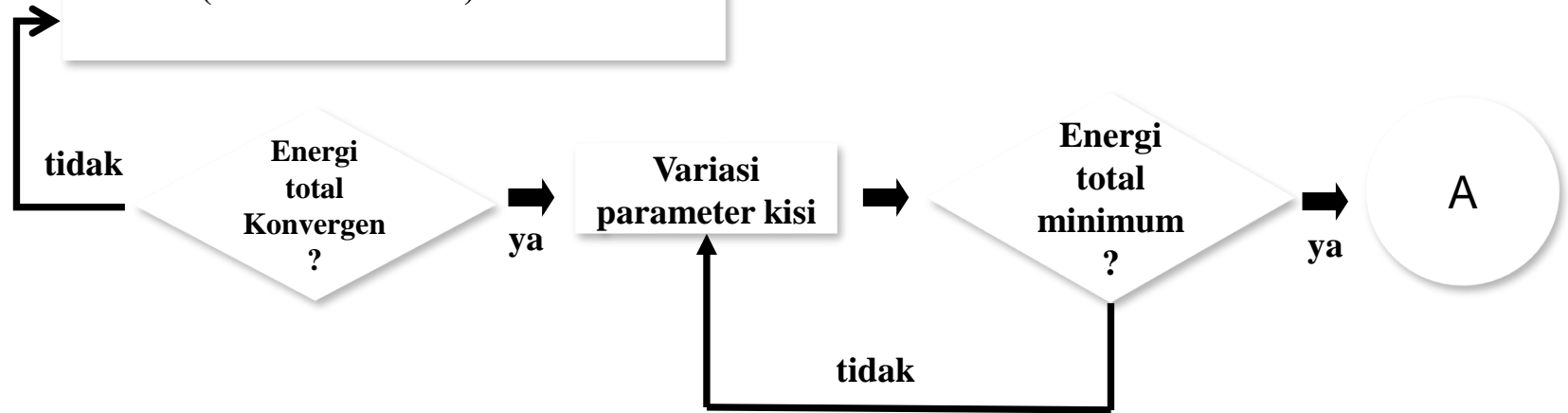
## Inisialisasi parameter

Konvergensi :

1. Energi Cut-off(ecut)
2. Banyaknya iterasi maksimum(nstep)
3. Jumlah kpoint
4. Acell (Lattice Constant)

## ALUR PENELITIAN

Tes Konvergensi



A

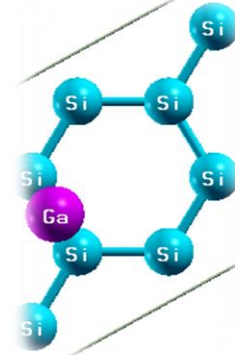
Perhitungan

ya

Doping  
adatom

Konstanta  
Dielektrik

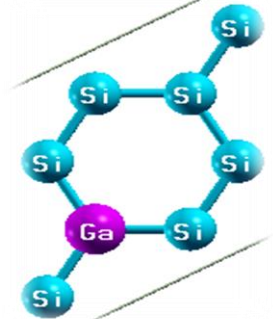
Posisi  
doping  
atom



Bridge



Hollow



Top

Perhitungan :

1. Indeks bias
2. Koefisien Pemantulan
3. Koefisien Penyerapan

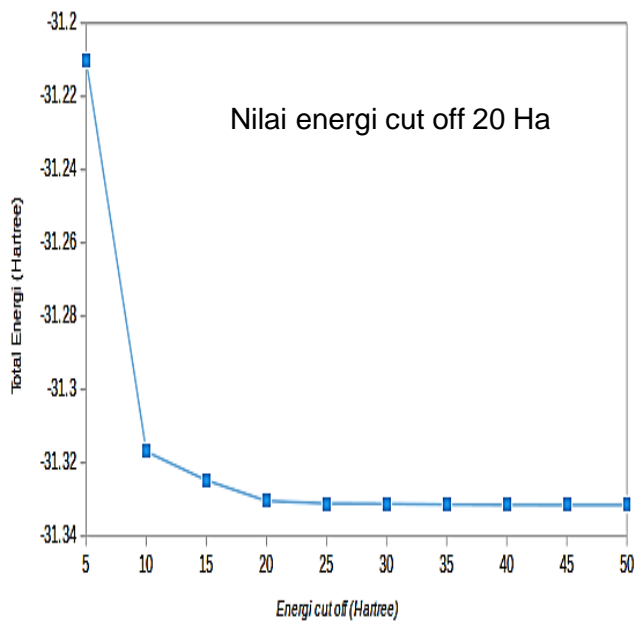
Hasil

	B	H	T
B	BB	HB	TB
H	BH	HH	TH
T	BT	HT	TT

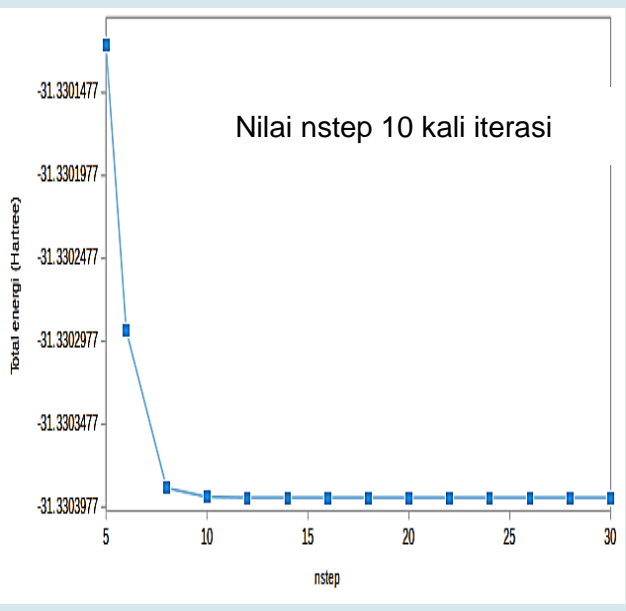
# HASIL & PEMBAHASAN

## Tes Konvergensi

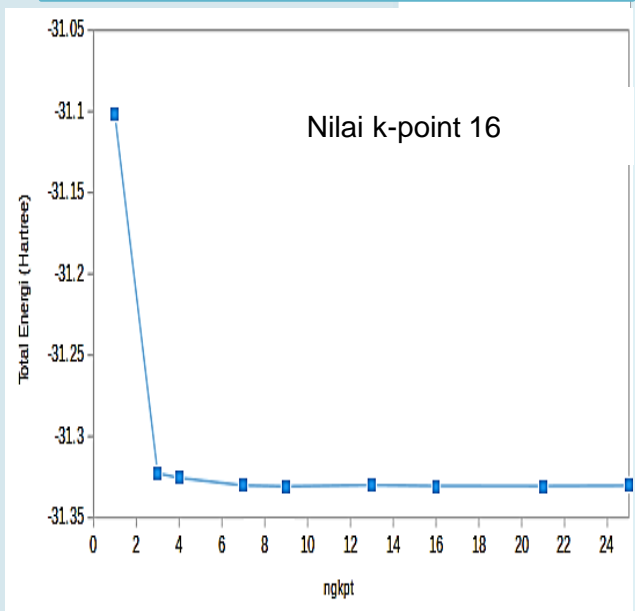
### Energi Cut off Silicene



### Banyaknya nstep Silicene

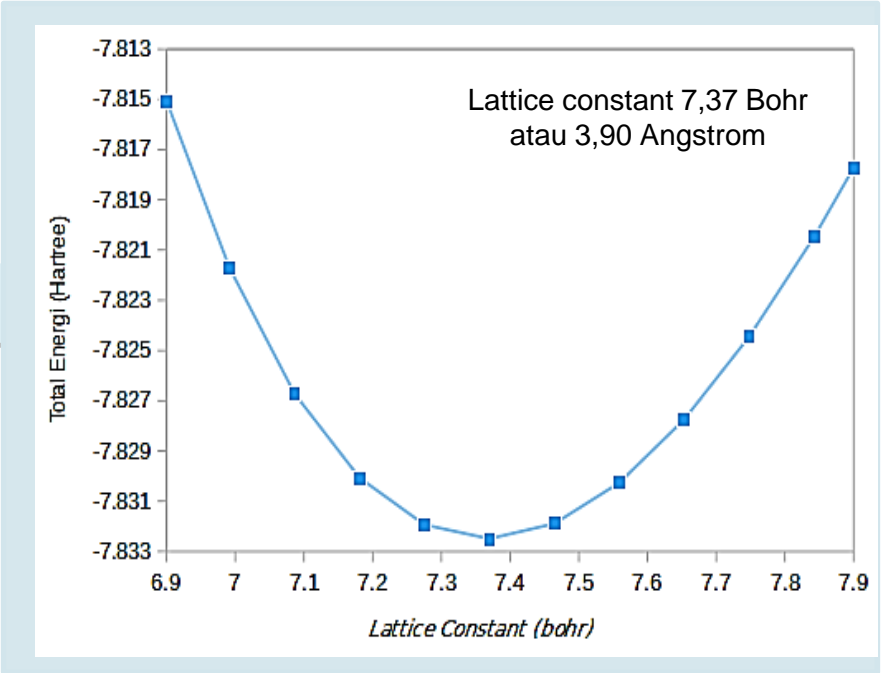


### Jumlah k-point Silicene



# Tes Validasi

## Lattice Constant of Silicene

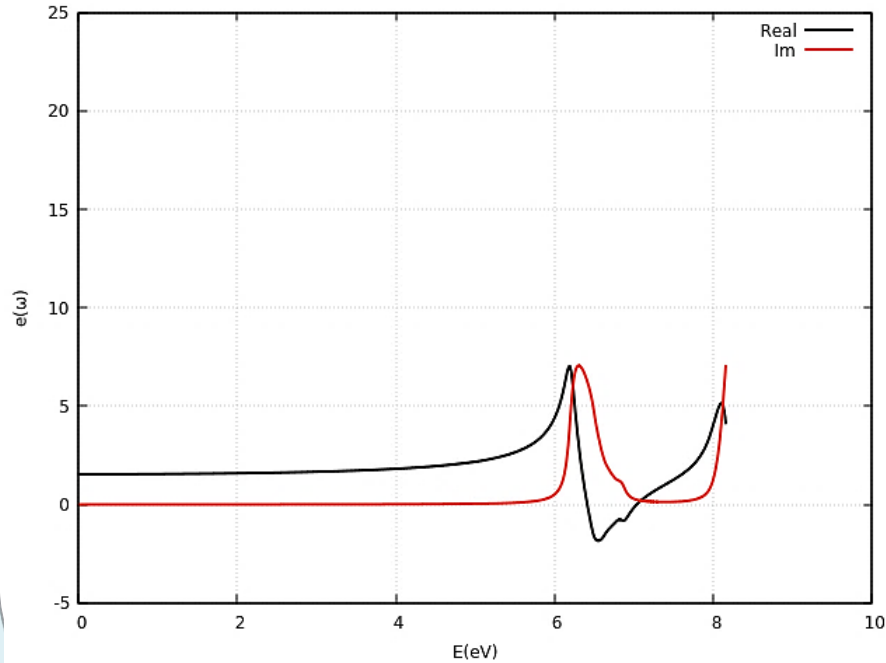


(Mohan dkk., 2013)	(Kaloni dkk., 2015)	(Lebegue, 2009)
3.85 Angstrom	3.91 Angstrom	3.90 Angstrom

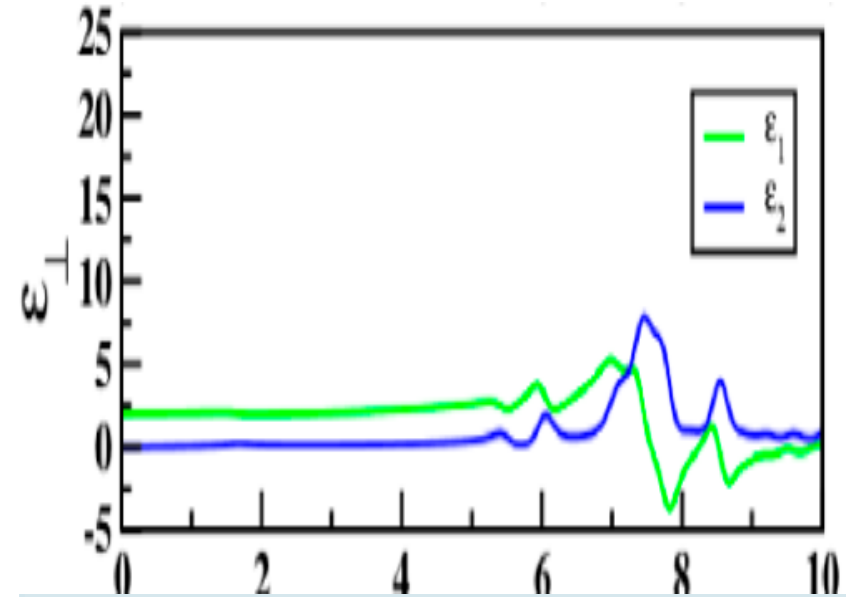


# Fungsi Dielektrik

## Fungsi dielektrik dari Silicene

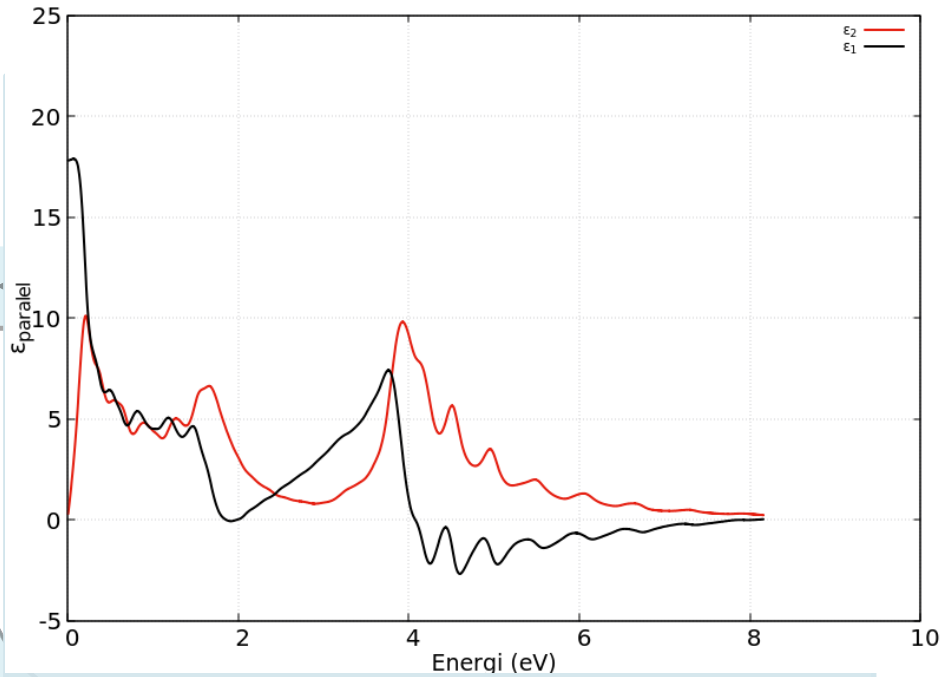


## Fungsi dielektrik dari Silicene (Chowdhury, 2016)

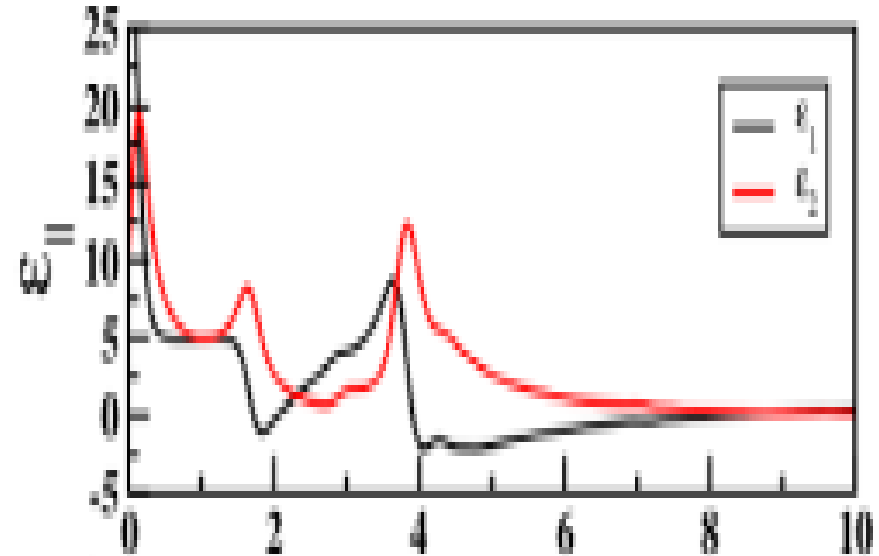


# Fungsi Dielektrik

## Fungsi dielektrik dari Silicene



## Fungsi dielektrik dari Silicene (Chowdhury, 2016)



Posisi		Energi (eV)	Nilai Maksimum
Silicene murni		6,20	2,76
Si-Ga	B	3,80	1,71
	H	4,12	1,61
	T	3,94	1,61
Si-As	B	3,82	1,82
	H	2,80	1,89
	T	5,82	1,77
Si-GaAs	BB	0,25	2,24
	BH	0,13	2,29
	BT	0,17	2,35
	HB	1,89	2,19
	HH	2,77	2,21
	HT	5,67	1,69
	TB	0,42	2,07
	TH	0,50	2,31
	TT	2,12	2,46

**(indeks bias (real))**



Posisi		Energi (eV)	Nilai Maksimum
Silicene murni		6,49	1,83
Si-Ga	B	5,71	1,06
	H	5,76	0,99
	T	6,16	0,85
Si-As	B	5,70	1,44
	H	5,79	0,99
	T	5,96	1,11
Si-GaAs	BB	3,30	1,66
	BH	3,65	1,04
	BT	3,19	1,32
	HB	3,15	1,14
	HH	2,96	1,23
	HT	5,89	1,41
	TB	2,59	1,43
	TH	0,94	0,94
	TT	2,78	1,73

**(indeks bias (imajiner))**



Posisi		Energi (eV)	Nilai Maksimum
Silicene murni		6,93	0,49
Si-Ga	B	5,75	0,20
	H	6,09	0,21
	T	6,17	0,14
Si-As	B	5,73	0,32
	H	2,98	0,15
	T	5,97	0,20
Si-GaAs	BB	3,45	0,35
	BH	4,60	0,18
	BT	3,40	0,27
	HB	2,25	0,21
	HH	2,94	0,23
	HT	5,99	0,32
	TB	2,60	0,27
	TH	5,83	0,18
	TT	2,82	0,36

## Koefisien pemantulan



Posisi		Energi (eV)	Nilai Maksimum
Silicene murni		6,48	0,12
Si-Ga	B	5,73	0,06
	H	5,99	0,06
	T	6,16	0,053
Si-As	B	5,71	0,08
	H	6,56	0,04
	T	5,96	0,07
Si-GaAs	BB	3,34	0,06
	BH	4,40	0,04
	BT	3,36	0,04
	HB	4,43	0,03
	HH	8,20	0,08
	HT	5,90	0,08
	TB	2,61	0,04
	TH	4,75	0,04
	TT	8,01	0,07

## Koefisien penyerapan



# Perhitungan Energi Cohesive

Energi kohesif untuk silicene murni

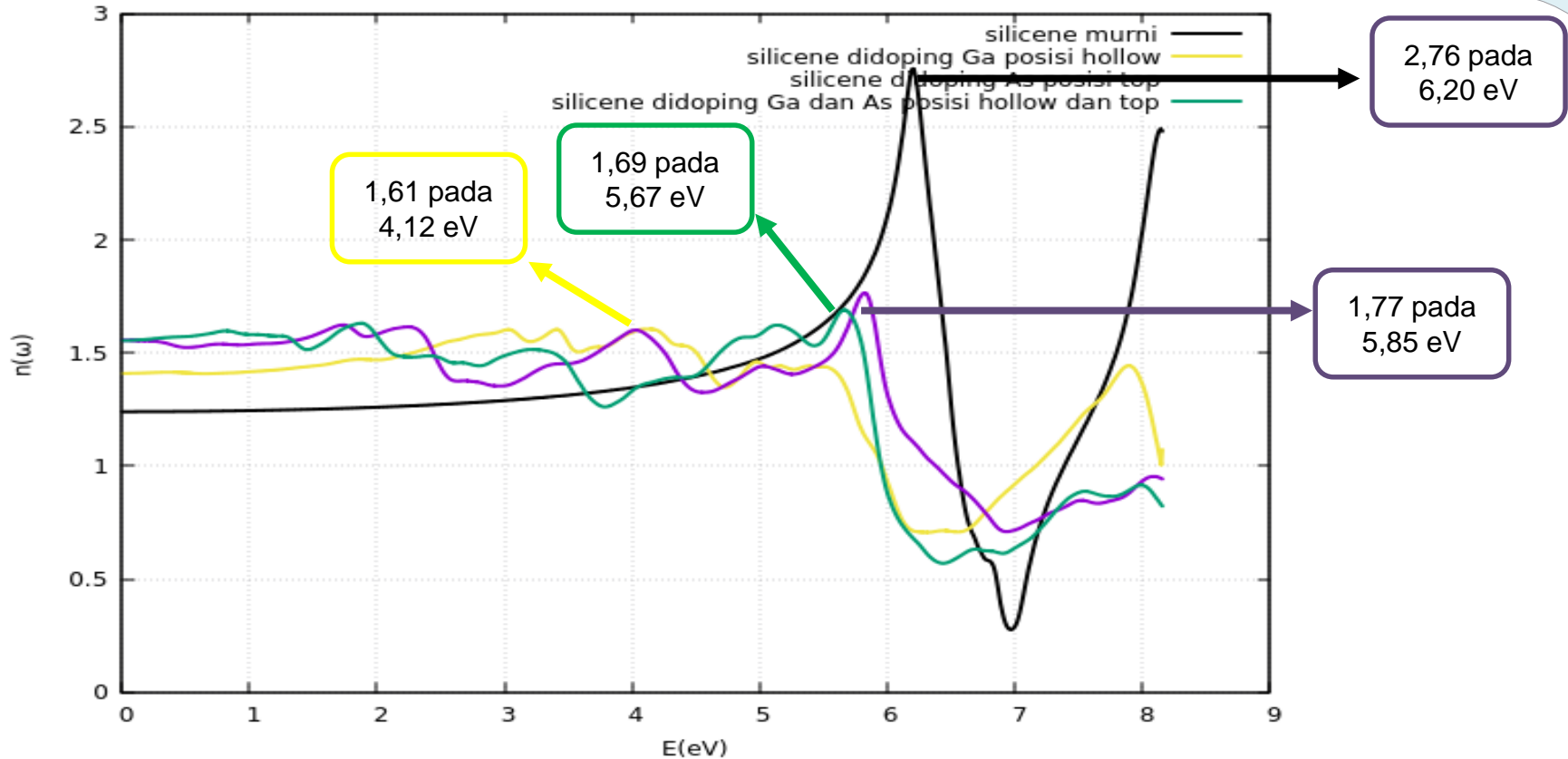
$$E_{cohesive} = \left( E_{total\ silicon} - \left( \frac{E_{total\ silicene}}{8} \right) \right)$$

Energi kohesif untuk silicene murni didoping Ga atau Arsenik

$$E_{cohesive} = (E_{total} - (E_{silicene} + E_{adatom}))$$

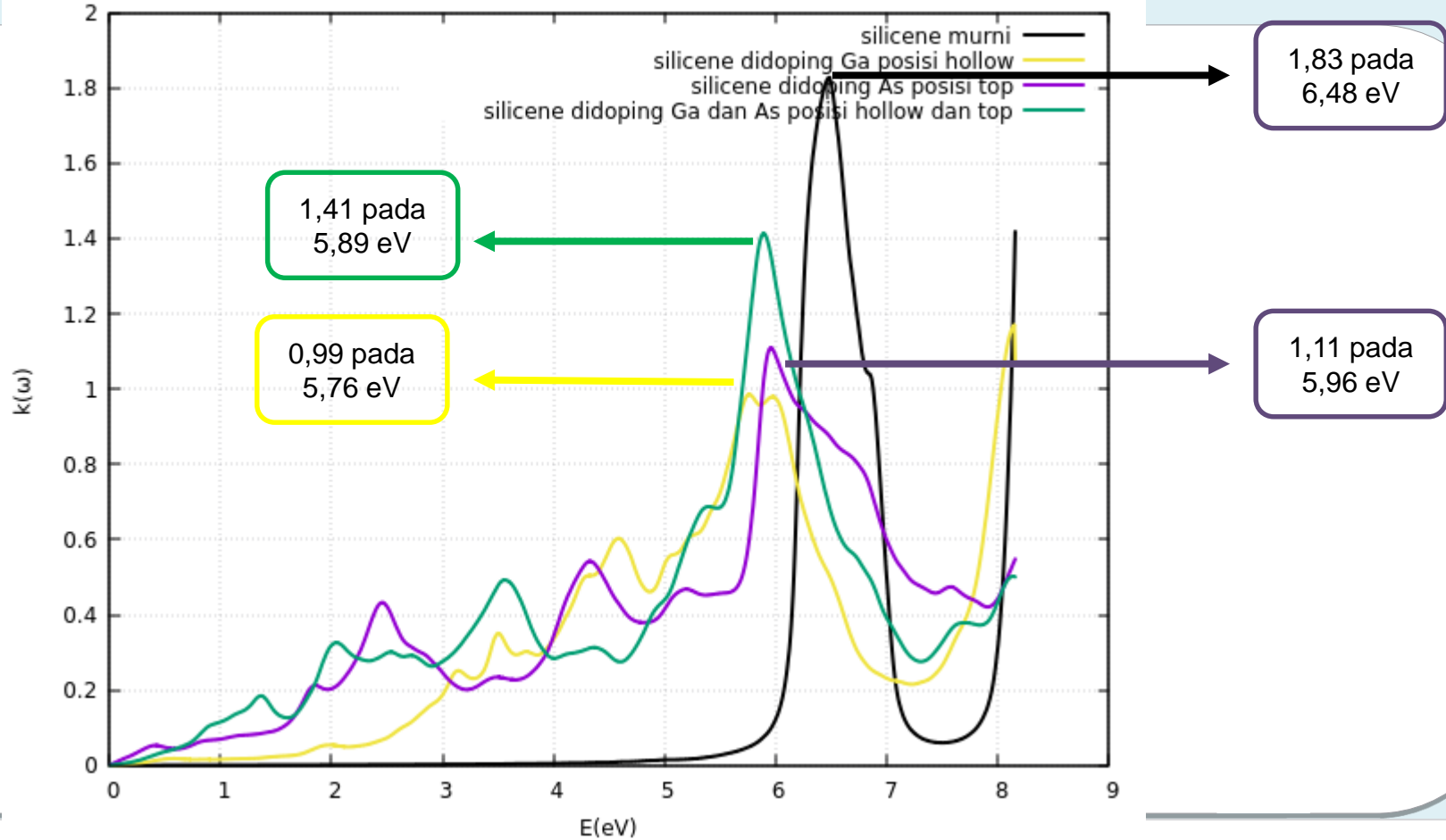
Doping		Energi Cohesive (Ha)
Silicene murni		4,33
Si-Ga	B	-1,25
	H	-1,63
	T	-0,70
Si-As	B	-1,08
	H	-1,28
	T	-1,45

# Perbandingan posisi (Indeks bias real)

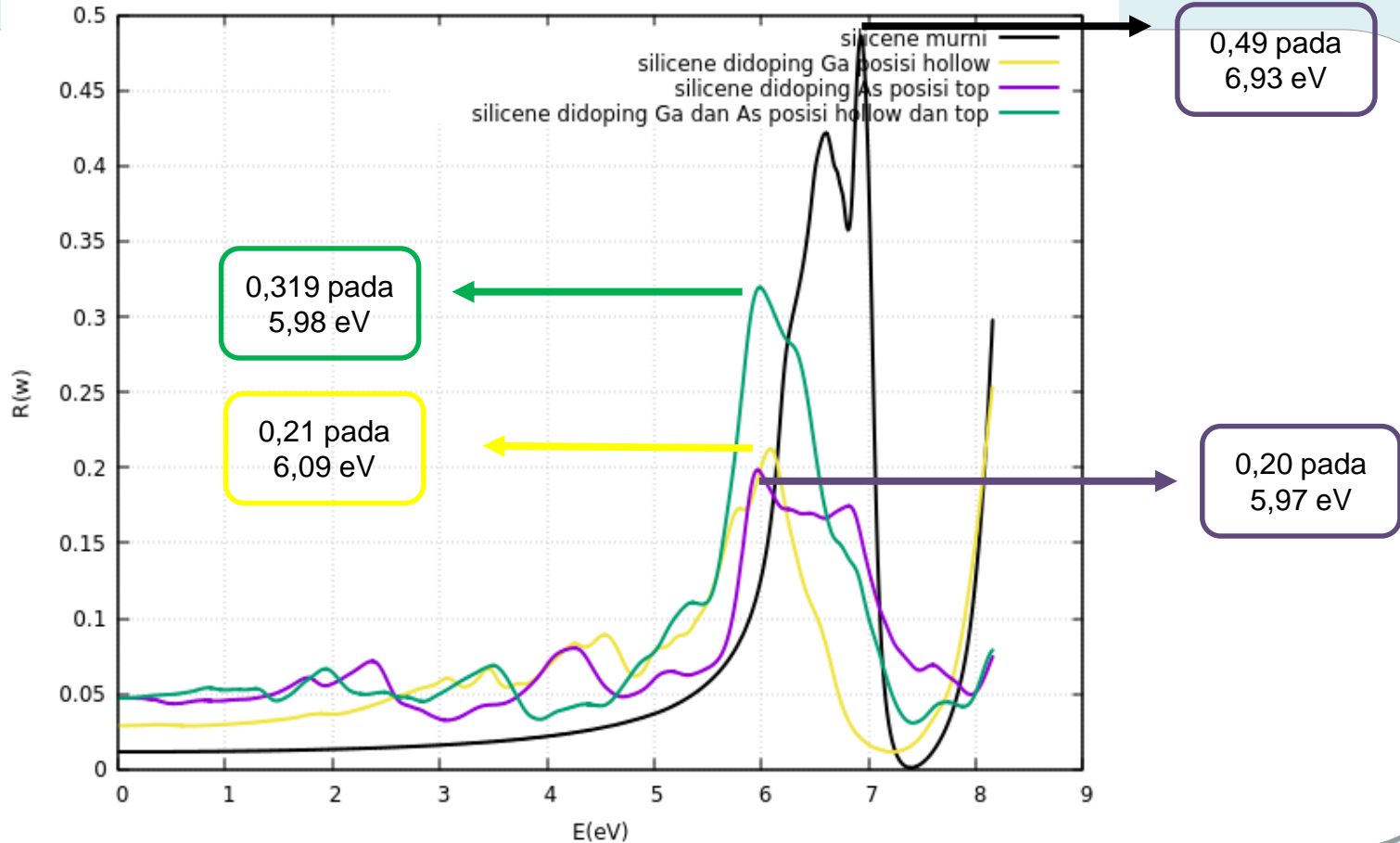




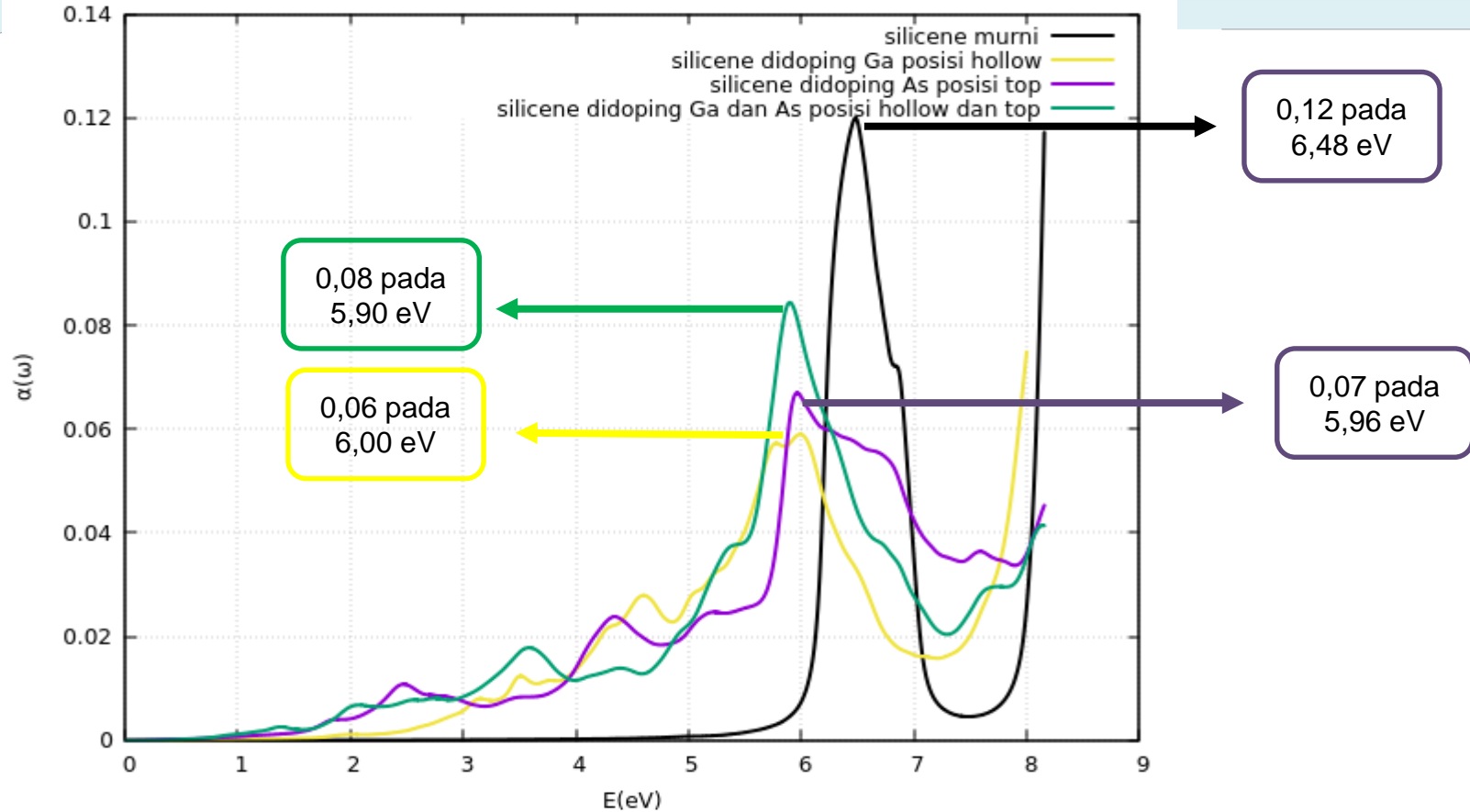
# Perbandingan posisi (Indeks bias imajiner)



# Perbandingan posisi (koefisien pemantulan)



# Perbandingan posisi (koefisien penyerapan)



## Kesimpulan

- Semua sifat optik silicene murni menurun ketika di doping dengan Ga, As dan GaAs.
- Nilai indeks bias (real) paling rendah pada saat silicene di doping dengan Gallium pada posisi hollow dan top. Nilai indeks bias (imaginer), koefisien pemantulan dan koefisien penyerapan paing rendah pada saat silicene didoping dengan Gallium pada posisi top.
- Nilai indeks bias (imaginer), koefisien pemantulan, koefisien penyerapan terendah pada saat silicene didoping dengan Arsenik pada posisi hollow. Nilai indeks bias (real) terendah pada saat silicene didoping dengan Arsenik pada posisi top.
- Nilai silicene murni yang didopping gallium arsenik untuk Nilai indeks bias, koefisien pemantulan, dan koefisien penyerapan mengalami penurunan

# Saran

Pada penelitian selanjutnya diharapkan meneliti tentang pengaruh variasi doping dan banyaknya doping dengan material dua dimensi yang berbeda

감사합니다 Natick

Grazie

Danke

Ευχαριστίες

Dalu

Thank You

Köszönöm

Tack

Спасибо

Dank

Gracias

谢谢

Merci

Seé

ありがとう

Obrigado