

Studi Sifat Elektronik Silicene dengan Pendekatan Teori Kerapatan Fungsional

Wafa Maftuhin, Mauludi Ariesto Pamungkas

Jurusan Fisika FMIPA Univ. Brawijaya
Email: wafamaftuhin@gmail.com

Abstract

Sifat elektronik dari Silikon dua dimensi berbentuk heksagonal yang disebut *silicene* telah diteliti dengan pendekatan teori kerapatan fungsional. Silicene diprediksi memiliki nilai konstanta kisi (*lattice constant*) sebesar 3,9 Angstrom, nilai ini mendekati hasil dari eksperimen. Silicene diprediksi memiliki sifat elektronik yang mirip dengan graphene. Pita energi silicene diprediksi tidak memiliki celah energi dan tidak saling tumpang tindih, banyaknya keadaan yang dominan adalah pada orbital p dan struktur membentuk ikatan kovalen.

Kata kunci : Silicene, Density functional theory.

Pendahuluan

Sejak berhasil ditemukannya *graphene* yang memiliki sifat yang unik (kuat, elastis) memberikan dampak positif bagi perkembangan teknologi di dunia [1]. Akan tetapi kurangnya celah energi dan ketidak kompatibelan graphene dengan teknologi semikonduktor [2] mendorong para ilmuwan untuk membuat material baru yang memiliki sifat mirip graphene yang berasal dari golongan yang sama dengan karbon yaitu gol IV. Golongan IV merupakan golongan atom semikonduktor (Si dan Ge) [3].

Silikon merupakan atom yang berasal dari golongan yang sama dengan karbon yaitu gol IV sehingga silikon memiliki karakter yang mirip dengan karbon [4]. Silikon telah mendominasi industri elektronik karena keberadaannya melimpah di bumi. Silikon merupakan elemen penting untuk teknologi semikonduktor dan perangkat elektronik berteknologi tinggi [5]. Jika struktur sarang lebah (heksagonal) silikon yang disebut *silicene* berhasil dibuat maka integrasi ke perangkat elektronik kemungkinan besar akan lebih disukai di bandingkan graphene [6].

Studi teoritis terbaru menunjukkan struktur pita elektronik silicene mirip dengan graphene [7], seperti graphene silicene memiliki sifat *Dirac* tak bermassa yang kecepatan elektronnya hanya seperseratus kecepatan cahaya [8], memiliki efek *hall quantum* [5]. Namun Secara alami silicene tidak ditemukan di alam karena silikon cenderung stabil pada hibridisasi sp^3 . Akan tetapi pada tahun 2009 silicene berhasil disintesis oleh Le Lay dkk di mana silicene berhasil ditumbuhkan di atas substrat Ag (110), (100) [9] dan di atas substrat Ag (111)[10] dan di atas substrat ZrB_2 [11]. Realisasi eksperimen silicene membuka peluang baru untuk menjelajahi sifat-sifatnya dan menjadikan silicene sebagai aplikasi yang

potensial [12]. Pada penelitian ini akan dibahas sifat elektronik silicene menggunakan pendekatan teori kerapatan fungsional.

Metode

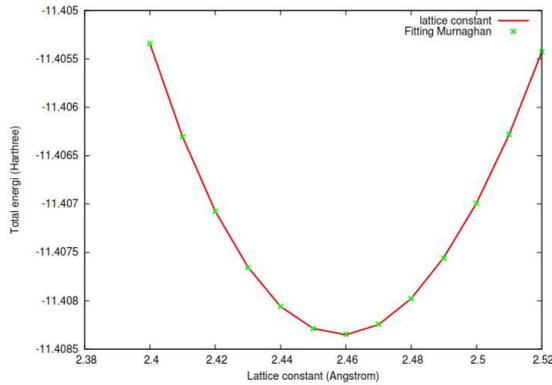
Metode yang dipakai pada penelitian ini adalah Teori kerapatan fungsional yang diimplementasikan dalam software ABINIT. Teori kerapatan fungsional merupakan metode pemodelan berbasis kuantum untuk penentuan struktur elektronik suatu bahan pada keadaan dasar melalui fungsional kerapatan. Konvergensi parameter kisi menjadi penting untuk mendapatkan hasil yang *realible* dan efisien. Energi *cut-off* yang digunakan adalah 20 Hartree. Sampling Kpoint menggunakan skema Monkhorst Pack $12 \times 12 \times 1$ grid. Energi total dihitung secara *self consistent* dengan bagian energi *exchange-corelation* didekati dengan GGA-PBE. Untuk mengatasi sistem yang periodik digunakan supersel 1×1 di mana sumbu z dibuat vakum pada jarak 15 Angstrom. Untuk melihat sifat elektronik digunakan analisa pita energi, rapat keadaan dan kerapatan elektron.

Hasil dan Pembahasan

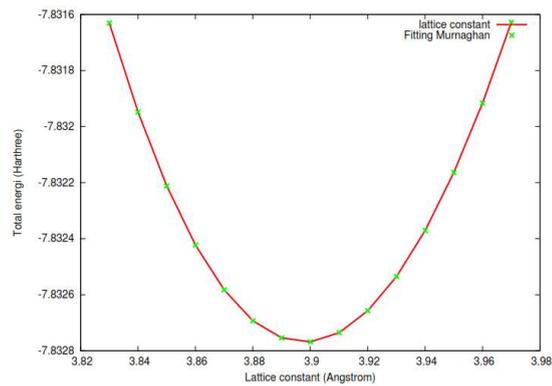
Ketika menghitung properti material sangat penting untuk memastikan bahwa sistem dalam kesetimbangan. Salah satu cara untuk melihat kesetimbangan sistem adalah dengan menghitung energi sistem yang paling minimum.

Dari hasil Perhitungan *lattice constant* graphene (Gambar 1) didapatkan nilai *lattice constant* graphene yang paling stabil adalah sebesar 2,46 Angstrom, nilai ini sama dengan hasil eksperimen yang dilakukan oleh Karpan tahun 2007 dan perhitungan komputasi oleh Brako tahun 2007. Sedangkan pada silicene

(Gambar 2) didapatkan *lattice constant* yang paling stabil sebesar 3,9 Angstrom, nilai ini mendekati hasil eksperimen yaitu sebesar 3,8 Angstrom yang dilakukan oleh Bouji Feng tahun 2012 dengan selisih sebesar 0,77 %. Hasil perhitungan ini sama dengan hasil perhitungan komputasi sebelumnya dengan metode *exchange correlation* GGA yang telah dilakukan oleh S. Lebegue dan O. Eriksson pada tahun 2009.



Gambar 1 Perbandingan nilai total energi terhadap *lattice constant* graphene.



Gambar 2 Perbandingan nilai total energi terhadap *lattice constant* silicene.

Tabel 1 Nilai konvergensi *lattice constant* silicene

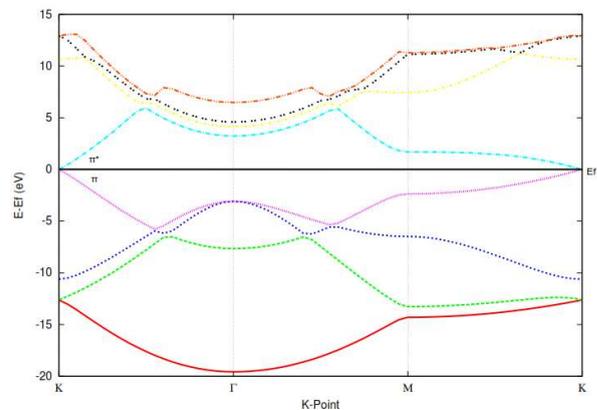
Jenis material	Hasil Perhitungan (Å)	Komputasi lain (Å)	Hasil eksperimen (Å)
Graphene	2,46	2,46[13]	2,46[14]
Silicene	3,90	3,90[15]	3,87[10]

Hasil perhitungan menunjukkan bahwa nilai *lattice constant* silicene lebih besar dibandingkan dengan graphene, menurut Lebegue tahun 2009 hal ini dikarenakan atom silikon yang berada pada struktur silicene memiliki jari jari atom yang lebih besar dibandingkan dengan karbon pada struktur graphene.

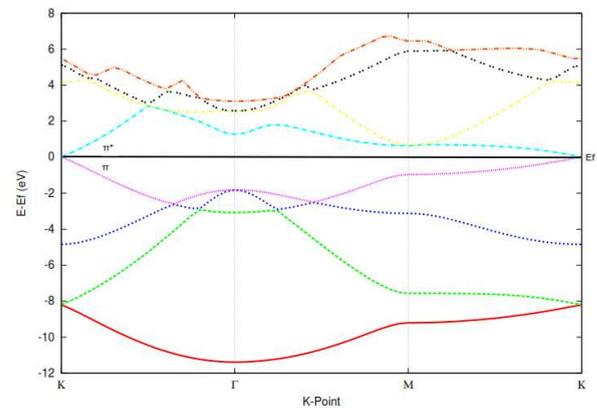
Pita energi graphene (Gambar 4), pada daerah energi Fermi terlihat bahwa antara pita valensi tertinggi (π) dan pita konduksi terendah (π^*) tidak saling tumpang tindih (*overlap*) dan

antara kedua pita tidak memiliki celah energi (*zero bandgap*), pita konduksi dan pita valensi graphene bertemu dititik K pada *brilluoin zone* yang menunjukkan hubungan *disperse linear*, karakter pita ini menunjukkan bahwa graphene memiliki sifat semimetal. Hal ini sesuai dengan studi teoritik yang telah dilakukan sebelumnya [16].

Untuk pita energi silicene (Gambar 5) memiliki bentuk pita energi yang hampir sama dengan graphene, di mana pada pita energi silicene tidak terdapat celah (*zero bandgap*) serta antara pita konduksi dan pita valensi tidak saling tumpang tindih (*overlap*). Kesamaan pita energi ini menunjukkan bahwa silicene memiliki sifat yang sama dengan graphene di mana kedua material memiliki sifat semimetal.

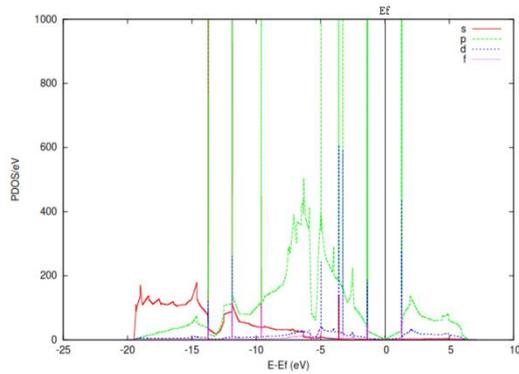


Gambar 3 Pita energi graphene

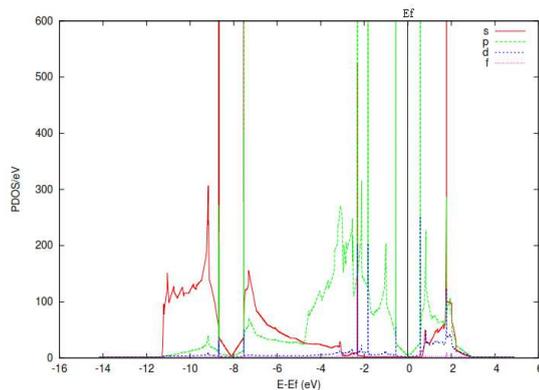


Gambar 4 Pita energi silicene.

Rapat keadaan proyeksi momentum (PDOS) graphene dan silicene (Gambar 5 & 6) memiliki karakter yang hampir sama, terlihat bahwa tidak adanya keadaan pada titik energi Fermi, tidak adanya keadaan tepat di energi Fermi ini menunjukkan bahwa silicene murni memiliki sifat semimetal dan orbital yang dominan adalah orbital p yang berada di sekitar energi Fermi, sedangkan orbital s tersedia pada energi rendah.

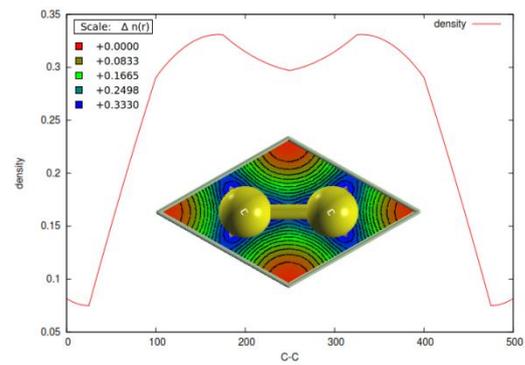


Gambar 5 Rapat keadaan proyeksi momentum angular (PDOS) graphene

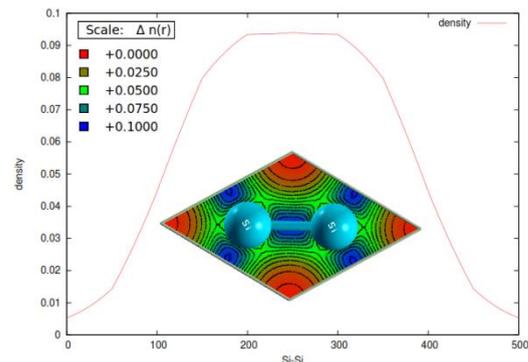


Gambar 6 Rapat keadaan proyeksi momentum angular (PDOS) silicene

Graphene dan silicene (Gambar 6 & 7) memiliki distribusi kerapatan elektron paling besar berada di antara ikatan atom C-C dan Si-Si. Hal ini terlihat pada plot kerapatan elektron pada bidang pilihan yang ditunjukkan oleh warna biru tua (lihat skala). Distribusi kerapatan elektron yang berada di antara ikatan antar atom ini menunjukkan bahwa graphene dan silicene memiliki ikatan kovalen.



Gambar 7 Kerapatan elektron graphene



Gambar 8 Kerapatan elektron silicene

Simpulan

Perhitungan dengan menggunakan metode teori kerapatan fungsional dapat digunakan untuk memprediksi kestabilan struktur dan sifat elektronik Silicene, dari perhitungan yang telah dilakukan didapatkan lattice constant silicene sebesar 3,9 Angstrom, terjadi perbedaan relatif sebesar 0,77 % dengan hasil eksperimen. Silicene memiliki pita energi *dispersi* linear yang memiliki sifat semimetal yang identik dengan graphene.

Daftar Pustaka

- [1] K. . Geim, A.K, Novoselov, "The Rise of Graphene," *Nat. Publ. Gr.*, pp. 183–191, 2007.
- [2] J. Sivek, H. Sahin, B. Partoens, and F. M. Peeters, "Adsorption and absorption of boron, nitrogen, aluminum, and phosphorus on silicene: Stability and electronic and phonon properties," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 87, no. 8, pp. 1–9, 2013.
- [3] S. A. Wella, M. Syaputra, and F. J. Nor, "First Principle Calculation untuk Menyelidiki Sifat Elektronik dan Sifat Magnetik Hydrogenated Germanene," vol. 1, no. 3, pp. 99–102, 2014.
- [4] P. Zhang, X. D. Li, C. H. Hu, S. Q. Wu, and Z. Z. Zhu, "First-principles studies of the hydrogenation effects in silicene sheets," vol. 376, pp. 1230–1233, 2012.
- [5] C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, "Quantum Spin Hall Effect in Silicene and Two-Dimensional Germanium," vol. 076802, no. AUGUST, pp. 1–4, 2011.
- [6] M. Houssa, E. Scalise, K. Sankaran, G. Pourtois, V. V. Afanas'ev, and a. Stesmans, "Electronic properties of hydrogenated silicene and germanene," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 98, no. 22, p. 223107, 2011.

- [7] N. D. Drummond, "Electrically tunable band gap in silicene," vol. 075423, pp. 1–7, 2012.
- [8] L. Chen, C. Liu, B. Feng, X. He, P. Cheng, and Z. Ding, "Evidence for Dirac Fermions in a Honeycomb Lattice Based on Silicon," vol. 056804, no. August, pp. 1–5, 2012.
- [9] G. Le Lay, B. Aufray, C. Léandri, H. Oughaddou, J.-P. Biberian, P. De Padova, M. E. Dávila, B. Ealet, and a. Kara, "Physics and chemistry of silicene nano-ribbons," *Appl. Surf. Sci.*, vol. 256, no. 2, pp. 524–529, Oct. 2009.
- [10] B. Feng, Z. Ding, S. Meng, Y. Yao, X. He, P. Cheng, L. Chen, and K. Wu, "Evidence of silicene in honeycomb structures of silicon on Ag(111)," *Nano Lett.*, vol. 12, no. 7, pp. 3507–3511, Mar. 2012
- [11] A. Fleurence, R. Friedlein, T. Ozaki, H. Kawai, Y. Wang, and Y. Yamada-Takamura, "Experimental Evidence for Epitaxial Silicene on Diboride Thin Films," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, no. 24, p. 245501, Jun. 2012.
- [12] T. H. Osborn, A. A. Farajian, O. V Pupysheva, R. S. Aga, and L. C. L. Yan, "Ab initio simulations of silicene hydrogenation," *Chem. Phys. Lett.*, vol. 511, no. 1–3, pp. 101–105, 2011.
- [13] Brako, R., Sokcevic, D., Lazic, P., dan Atodiresei, N. *Graphene on Ir(111) surface: Fromvander Waals to strong bonding, (111)*, 1–9. Mesoscale and Nanoscale Physics. 2010.
- [14] Karpan, V., Giovannetti, G., Khomyakov, P., Talanana, M., Starikov, a., Zwierzycki, M., ... Kelly, P. *Graphite and graphene as perfect spin filters. Physical Review Letters*, 99(17). 2007.
- [15] S. Lebègue and O. Eriksson, "Electronic structure of two-dimensional crystals from ab initio theory," *Phys. Rev. B*, vol. 79, no. 11, p. 115409, Mar. 2009.
- [16] A. H. C. Neto, "The electronic properties of graphene," vol. 81, no. March, 2009.