

EFEK *DOPING* ATOM ARSENIK PADA PITA ENERGI MATERIAL *SILICENE* BERDASARKAN PERHITUNGAN TEORI KERAPATAN FUNGSIONAL

Mauludi Ariesto Pamungkas dan Wafa Maftuhin

Jurusan Fisika, FMIPA-Universitas Brawijaya

Jl. Veteran, Malang 65145

E-mail: m_ariesto@ub.ac.id

Diterima: 07 April 2015

Diperbaiki: 12 Mei 2015

Disetujui: 09 Juni 2015

ABSTRAK

EFEK *DOPING* ATOM ARSENIK PADA PITA ENERGI MATERIAL *SILICENE* BERDASARKAN PERHITUNGAN TEORI KERAPATAN FUNGSIONAL. Menyusul sukses *graphene* dengan sifat-sifatnya yang super dan unik, material dua dimensi yang strukturnya serupa dengan *graphene* menjadi pusat perhatian para peneliti material. *Silicene* sebagai material yang memiliki struktur kristal sama dengan *graphene* namun terdiri dari atom-atom *silicon* menjadi material yang sangat penting mengingat dominasi *silicon* sebagai bahan utama komponen elektronika. Struktur pita dari *silicene* murni dan yang di *doping* dengan atom As diteliti dengan metode teori kerapatan fungsional (*Density Functional Theory*). Atom As disimulasikan pada beberapa posisi yang paling mungkin. Berdasarkan perhitungan energi pembentukan, posisi substitusi adalah posisi yang paling stabil dari atom As pada *silicene*. Posisi atom As tepat di atas atom silikon jauh lebih stabil dari posisi di atas hexagonal (posisi *hollow*). Hasil perhitungan struktur pita menunjukkan bahwa *silicene* murni adalah semimetal sedangkan setelah di-*doping* dengan atom As berubah menjadi konduktor. Hasil ini berbeda dengan penambahan atom As pada *graphene*, di mana justru membuka *band gap* nya.

Kata kunci: *Silicene*, Arsenik, Teori Kerapatan Fungsional

ABSTRACT

EFFECT OF ARSENIC ATOM DOPING ON BAND STRUCTURE OF SILICENE USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY. Following the success of *graphene* which possesses unique and superior properties, 2D material other than *graphene* become centre of interest of material scientists. *Silicene*, which has the same crystal structure as *graphene* but consist of silicon atoms rather than carbon become intriguing material due to domination of silicon as main material of electronic component. Band structure of pristine *silicene* and *silicene* doped with As atom are calculated using Density Functional Theory. As atom is placed in several most possible positions. Formation energy calculation shows that substitution position of As atom is the most stable position. Position of As adatom over silicon atoms is significantly more stable than over the hexagonal (*hollow* position). The result shows that pristine *silicene* is semimetal while *silicene* doped with As atom in all possible positions change it to be a conductor. This is contrast to As doped on *graphene* which open its band gap.

Keywords: *Silicene*, Arsenic, Density Functional Theory

PENDAHULUAN

Setelah penemuan *graphene*, material berupa satu lembar atom-atom karbon dengan bentuk struktur kristal seperti sarang lebah yang sangat fenomenal, para peneliti material mencurahkan segenap perhatiannya untuk terus

menggali sifat-sifat *graphene* dengan berbagai modifikasi, perlakuan dan campuran dengan unsur lain [1]. Di samping itu, saat ini para peneliti juga secara

intensif melakukan hal yang sama untuk material dengan struktur *graphene* namun berbeda atom penyusun seperti *silicene* (dari atom silikon), *germanene* (dari atom germanium) dan *fosforene* (dari atom fosfor). Untuk keperluan dunia elektronik, di mana sampai saat ini silikon masih mendominasi, *silicene* menjadi sangat menarik untuk dieksplorasi. Karena itu, bahkan sebelum sukses disintesis pada Ag (111) substrat [2], *silicene* telah diprediksi secara teoritik [3]. Beberapa bulan lalu berhasil dibuat lapisan aktif pada transistor dari *silicene* [4]. Studi teoritik belakangan menunjukkan bahwa struktur *silicene* yang eksis tidak benar-benar datar, melainkan sedikit tertekuk. Hasil dari studi teoritik yang sangat penting telah menunjukkan bahwa struktur pita energi *silicene* serupa dengan struktur pita energi *graphene*.

Di samping itu, karena sedikit tekukan (*buckle*) celah energi dari *silicene* dapat dikontrol dengan medan listrik [5-6]. Seperti juga *graphene*, *silicene* memiliki properti *Dirac fermion* tidak bermassa yang kecepatannya seperseratus dari kecepatan cahaya [7]. Di antara kesamaan lain dengan *graphene* adalah adanya efek *quantum hall* [8]. Melihat berbagai persamaan dan sedikit perbedaan antara *graphene* dan *silicene* sebagaimana disebutkan di atas, maka bisa diharapkan adanya kesamaan-kesamaan dan perbedaan keduanya pada properti-properti yang lain dengan perlakuan yang sama pada kedua material.

Sebagian perlakuan yang telah diterapkan pada *graphene* untuk mengubah struktur elektroniknya sudah diterapkan pada *silicene* baik secara eksperimen maupun dengan simulasi. Perlakuan yang telah dilakukan diantaranya: pemberian medan listrik [5], regangan (*strain*) [9-10], fungsionalisasi berupa hidrogenisasi dan florisasi [11], oksidasi [12], dan pengotoran (*doping*). Telah diteliti juga efek dari pengotoran (*doping*) dari beberapa unsur pada *graphene* seperti atom Boron, Fosfor [13] serta nitrogen [14-15]. Efek dari penambahan unsur-unsur ini terhadap pita energi *silicene* berlainan.

Pada paper ini akan dipaparkan hasil perhitungan dengan teori kerapatan fungsional (*density functional theory*) *silicene* yang di-*doping* dengan *Arsenic*. Hasilnya diharapkan bisa menjadi pengaruh dalam percobaan pembuatan dan rekayasa *property silicene*.

METODE PERCOBAAN

Perhitungan dilakukan dengan menggunakan Teori Kerapatan Fungsional (*Density functional Theory*) yang diimplementasikan dalam perangkat lunak ABINIT [16]. Interaksi antara electron dan ion *core* direpresentasikan dengan *norm conserving pseudopotential*. Formulasi Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) formulation GGA [17] dipilih untuk menggambarkan kontribusi *electron exchange correlation*. Energi

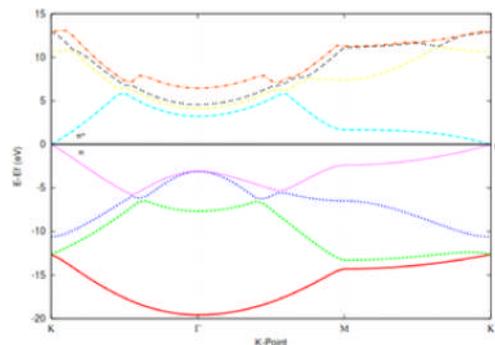
Cutoff sebesar 20 *hartree* dipilih karena menunjukkan konvergensi. Titik-titik k (ruang momentum) khusus dibangkitkan dengan skema Monkhorst-Pack [18].

Silicene yang dihitung memiliki struktur pinggir *armchair* dan ukuran 1x1 dan 2x2 sel satuan. Lapisan vakum dengan lebar 15 angstrom diimplementasikan pada arah z untuk membuat lembaran *silicene*. Dengan lebar lapisan vakum 15 angstrom, interaksi antara dua lapisan bisa diabaikan. Satu atom *Arsenic* ditempatkan pada beberapa posisi yang mungkin. Untuk mendapatkan jarak optimum dan stabil, *silicene* dengan *Arsenic* atom tersebut kemudian direlaksasi sampai mencapai energi total yang minimum.

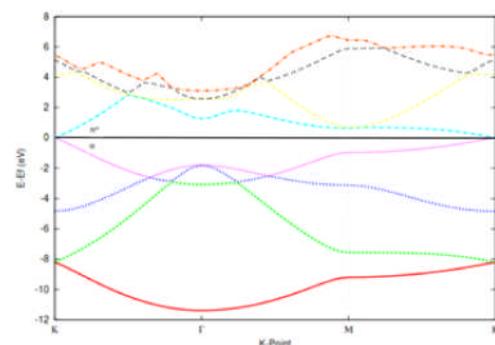
HASIL DAN PEMBAHASAN

Pita Energi *Graphene* dan *Silicene* Murni

Hasil perhitungan struktur pita energi dari *graphene* dan *silicene* murni seperti yang ditunjukkan pada Gambar 1 dan Gambar 2 menunjukkan bahwa *silicene* murni memiliki struktur pita energi yang serupa dengan *graphene* murni dengan tanpa celah energi dan juga tanpa ada tumpang tindih atau bisa dikatakan memiliki nol celah energi (*zero band gap*). Hasil ini sesuai dengan beberapa penelitian sebelumnya [19]. Perhitungan pita energi *graphene* murni dan *silicene* murni ini sekaligus memvalidasi parameter-parameter yang digunakan dalam perhitungan.



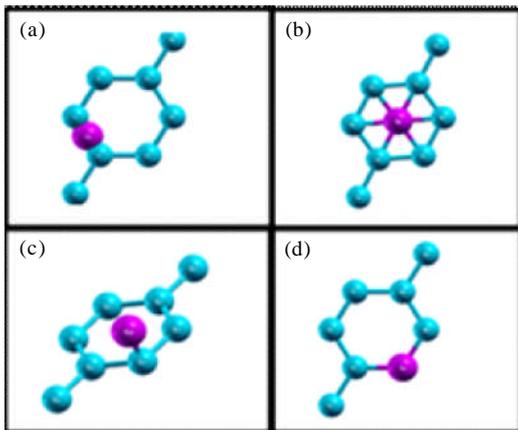
Gambar 1. Pita energi *graphene* murni, aneka warna menunjukkan level energi.



Gambar 2. Pita energi *silicene* murni, aneka warna menunjukkan level energi.

Energi Minimum Silicene yang Di-doping Atom Arsenic pada Beberapa Posisi yang Mungkin

Atom silicene ditaruh di beberapa posisi yang paling mungkin seperti pada Gambar 3. Setelah itu sistem direlaksasi agar atom-atom mencapai kondisi setimbangnya. Dari posisi-posisi yang paling mungkin tersebut, seperti ditunjukkan pada Tabel 1, terlihat bahwa posisi S adalah posisi yang paling stabil diantara posisi-posisi yang paling mungkin untuk atom Arsenic yang di-doping karena energi pembentukannya paling kecil.



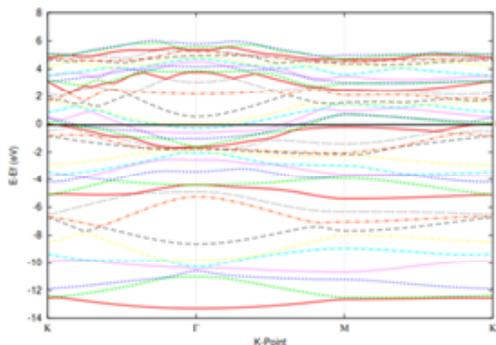
Gambar 3. Doping pada silicene super sel 2x2 (a). doping atom pada posisi di antara ikatan silikon-silikon (B-site) (b). doping atom pada posisi di tengah struktur heksagonal (H-site) (c). doping padaposisi di atas salah satu atom silikon (T-site) dan (d). doping atom substitusi (S-site).

Tabel 1. Energi pembentukan silicene di-doping arsenik dengan beberapa posisi.

Posisi doping	Energy (eV)
As B-site	0,53
As H-site	0,93
As T-site	-2,78
As S-Site	-2,82

Energi pembentukan merupakan energi yang dibutuhkan untuk membentuk suatu material.

$$E_{\text{formation}} = (E_{\text{total}} - E_{\text{silicene}} - E_{\text{atom arsenic}} + \mu_{\text{silicene}} - \mu_{\text{arsenik}}) \dots (1)$$

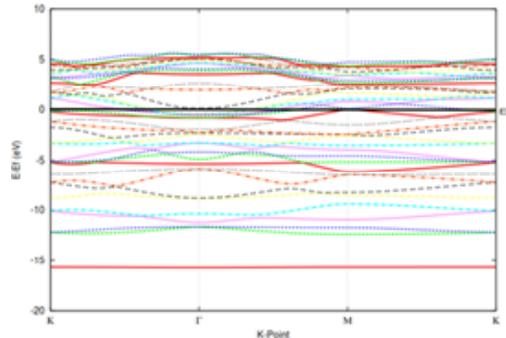


Gambar 4. Pita energi silicene di-doping dengan atom As pada posisi B-site. Aneka warna menunjukkan level energi.

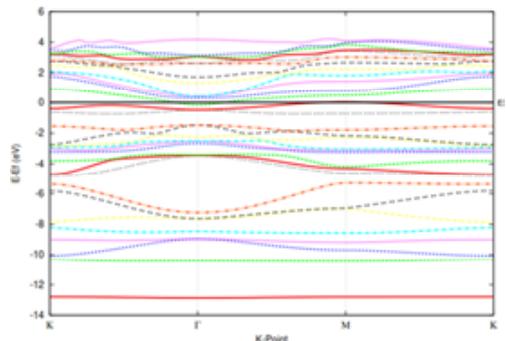
Di mana :

- $E_{\text{formation}}$ = Energi pembentukan silicene yang di-doping
- E_{total} = Energi total silicene yang di-doping
- E_{silicene} = Energi pembentukan silicene
- $E_{\text{atomarsenik}}$ = Energi atom arsenik yang tersiolasi
- μ = Potensial kimia

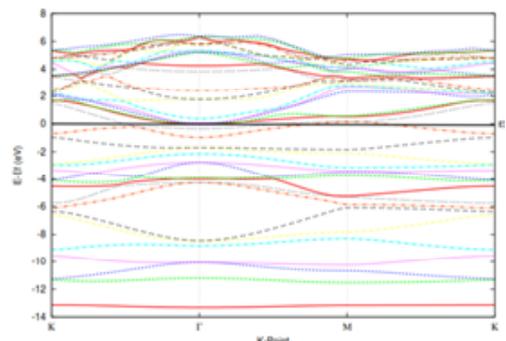
Gambar 4 sampai dengan Gambar 7 menunjukkan pita energi silicene yang di-doping atom As pada beberapa posisi yang paling mungkin. K point dipilih yang paling tinggi simetrinya. Energi Fermi diset pada harga nol, ditandai dengan garis hitam tebal.



Gambar 5. Pita energi silicene di-doping dengan atom As pada posisi H-site. Aneka warna menunjukkan level energi.



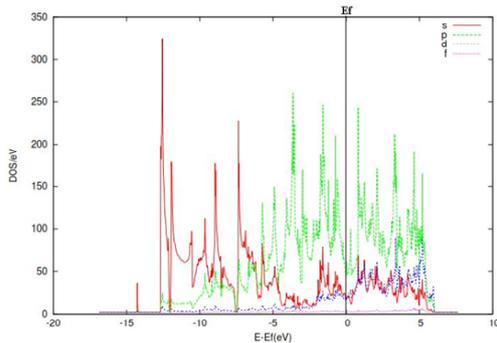
Gambar 6. Pita energi silicene di-doping dengan atom As pada posisi T-site. Aneka warna menunjukkan level energi.



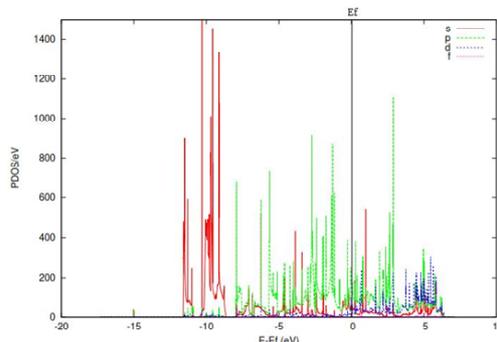
Gambar 7. Pita energi silicene di-doping dengan atom As pada posisi S-site. Aneka warna menunjukkan level energi.

Untuk Pita energi silicene di-doping dengan atom As dengan posisi B-Site (Gambar 4) terjadi perubahan pita energi di mana tampak tidak adanya celah pengisian pita pada energi Fermi dan pita tidak membentuk Dirac point seperti silicene murni. Tidak adanya gap ini

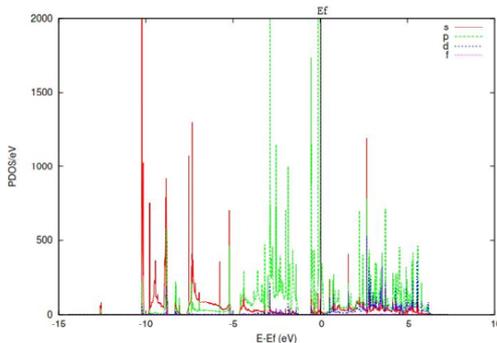
menunjukkan bahwa material bersifat konduktor (metal), hal yang sama juga terjadi pada *doping* atom As pada posisi H-site (Gambar 5), T-site (Gambar 6) dan S-site (Gambar 7), di mana pada struktur pita energi tampak tidak adanya celah energi pada energi Fermi yang menunjukkan bahwa material bersifat konduktor. Ketiadaan celah energi juga dapat terlihat dengan Rapat keadaan (*Density of State*) seperti ditunjukkan pada Gambar 8 sampai dengan Gambar 11. Pada gambar-gambar tersebut terlihat bahwa ada *state* pada daerah sekitar energi Fermi yang didominasi orbital p.



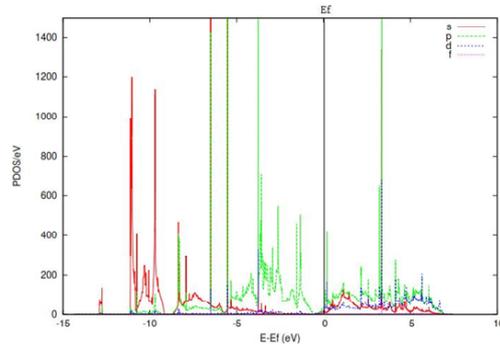
Gambar 8. Partial Density of State (PDOS) silicene di-*doping* dengan atom As pada posisi B-site. Warna merah menunjukkan kontribusi dari orbital: merah untuk orbital s, hijau untuk orbital p, biru untuk orbital d, serta ungu untuk orbital f.



Gambar 9. Partial Density of State (PDOS) silicene didoping dengan atom As pada posisi H-site. Warna merah menunjukkan kontribusi dari orbital: merah untuk orbital s, hijau untuk orbital p, biru untuk orbital d, serta ungu untuk orbital f.



Gambar 10. Partial Density of State (PDOS) silicene di-*doping* dengan atom As pada posisi T-site. Warna merah menunjukkan kontribusi dari orbital: merah untuk orbital s, hijau untuk orbital p, biru untuk orbital d, serta ungu untuk orbital f.



Gambar 11. Partial Density of State (PDOS) silicene di-*doping* dengan atom As pada posisi S-site. Warna merah menunjukkan kontribusi dari orbital: merah untuk orbital s, hijau untuk orbital p, biru untuk orbital d, serta ungu untuk orbital f.

Efek dari *doping* arsenik pada struktur elektronik silicene ini sangat berbeda dengan efeknya pada struktur elektronik graphene [20]. Berbeda juga dengan pengaruh *doping* atom Boron dan atom Fosfor yang mengubah silicene menjadi semikonduktor dengan celah pita (*band gap*) semakin berkurang dengan bertambahnya konsentrasi Boron dan Fosfor [21].

KESIMPULAN

Posisi *doping* atom As pada silicene paling mungkin berada pada posisi mensubstitusi satu atom silicon. Posisi atom As tepat di atas atom silikon memiliki energi sedikit lebih tinggi dari posisi mensubstitusi, sehingga lebih stabil dibandingkan posisi lain selain posisi substitusi. Material silicene berubah sifat elektroniknya dari semimetal menjadi metal atau konduktor bila diberikan *doping* atom As. Hal ini terjadi untuk seluruh posisi atom As yang paling mungkin.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada pimpinan universitas Brawijaya, dari mulai ketua jurusan Fisika sampai dengan pimpinan perguruan tinggi

DAFTAR ACUAN

- [1]. A. H. C. Neto and K. Novoselov. "New Directions in Science and Technology: Two-Dimensional Crystals". *REPORTS Prog. Phys.*, vol. 74, no. 8, Aug. 2011.
- [2]. S. Fagan, R. Baierle, R. Mota, *et al.* "Ab Initio Calculations for a Hypothetical Material: Silicon Nanotubes". *Phys. Rev. B*, vol. 61, no. 15, pp. 9994-9996, Apr. 2000.
- [3]. P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, *et al.* "Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon". *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, no. 15, pp. 155501, Apr. 2012.

- [4]. L. Tao, E. Cinquanta, D. Chiappe, *et al.* "Silicene field-effect transistors operating at room temperature". *Nat. Nanotechnol.*, vol. 10, no. 3, pp. 227-231, 2015.
- [5]. N. D. Drummond, V. Zólyomi, and V. I. Fal'ko. "Electrically Tunable Band Gap in Silicene". *Phys. Rev. B*, vol. 85, no. 7, pp. 075423, Feb. 2012.
- [6]. Z. Ni, Q. Liu, K. Tang, *et al.* "Tunable bandgap in silicene and germanene". *Nano Lett.*, vol. 12, no. 1, pp. 113-8, Jan. 2012.
- [7]. L. Chen, C.-C. Liu, B. Feng, *et al.* "Evidence for Dirac Fermions in a Honeycomb Lattice Based on Silicon". *Phys. Rev. Lett.*, vol. 109, no. 5, pp. 056804, Aug. 2012.
- [8]. C.-C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, "Quantum Spin Hall Effect in Silicene and Two-Dimensional Germanium". *Phys. Rev. Lett.*, vol. 107, no. 7, pp. 076802, Aug. 2011.
- [9]. Q. X. Pei, Y. W. Zhang, Z. D. Sha, *et al.* "Tuning the Thermal Conductivity of Silicene with Tensile Strain and Isotopic Doping: A Molecular Dynamics Study". *J. Appl. Phys.*, vol. 114, no. 3, pp. 26-32, 2013.
- [10]. R. Qin, C. H. Wang, W. Zhu, *et al.* "First-Principles Calculations of Mechanical and Electronic Properties of Silicene Under Strain". *AIP Adv.* vol. 2, no. 2, pp. 0-6, 2012.
- [11]. Y. Ding and Y. Wang. "Electronic Structures of Silicene Fluoride and Hydride". *Appl. Phys. Lett.* vol. 100, no. 8, pp. 083102, 2012.
- [12]. Y. Du, J. Zhuang, H. Liu, *et al.* "Tuning the Band Gap in Silicene by Oxidation". no. 10, pp. 10019-10025, 2014.
- [13]. X. Pi, Z. Ni, Y. Liu, *et al.* "Density Functional Theory Study on Boron and Phosphorus-Doped Hydrogen-Passivated Silicene". *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 17, no. 6, pp. 4146-4151, 2015.
- [14]. J. Sivek, H. Sahin, B. Partoens, *et al.* "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.
- [15]. L. Ma, J.-M. Zhang, K.-W. Xu, *et al.* "Nitrogen and Boron Substitutional Doped Zigzag Silicene Nanoribbons: Ab Initio Investigation". *Phys. E Low-Dimensional Syst. Nanostructures*, vol. 60, pp. 112-117, 2014.
- [16]. X. Gonze, J. M. Beuken, R. Caracas, *et al.* "First-Principles Computation of Material Properties: The ABINIT Software Project". *Comput. Mater. Sci.*, vol. 25, no. 3, pp. 478-492, 2002.
- [17]. J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, D. of Physics, and N. O. L. 70118 J. Quantum Theory Group Tulane University. "Generalized Gradient Approximation Made Simple". *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, no. 18, pp. 3865-3868, 1996.
- [18]. J. D. Pack and H. J. Monkhorst. "Special Points for Brillouin-Zone Integrations'-a Reply". *Phys. Rev. B*, vol. 16, no. 4, pp. 1748-1749, 1977.
- [19]. S. Lebegue and O. Eriksson. "Electronic Structure of Two-Dimensional Crystals from ab Initio Theory". *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 79, no. 11, pp. 4-7, 2009.
- [20]. P. a. Denis. "Chemical Reactivity and Band-Gap Opening of Graphene Doped with Gallium, Germanium, Arsenic, and Selenium Atoms". *Chem. Phys. Chem.*, vol. 15, no. 18, pp. 3994-4000, 2014.