

Studi Teoritis Efek Doping Atom Trivalen pada Kristal Silikon

Mega, Irwan Ramli*, Aryadi Nurfaq

Program Studi Fisika Fakultas Sains Universitas Cokroaminoto Palopo, Indonesia

Email korespondensi : irwan@uncp.ac.id

ABSTRACT– Silicon is a tetravalent metalloid element, less reactive than carbon or non-metal elements that are right below the periodic table. This study was conducted to determine the electronic properties of Silicon doped with Boron (Si), the electronic properties of Silicon are known by analyzing and calculating the Electronic Band Structure and Density Of State (DOS) using the Density Functional Theory (DFT) computational method using Quantum Espresso software. The calculation was carried out with the energy cut-off wave function ($ecutwfc = 40$ Ry) and the optimal K-Point 5 5 5, where the results of the calculation obtained an electronic bands structure that showed that there was no band gap or zero band gap. While the DOS calculation contains an energy level that passes the Fermi energy.

ABSTRAK–Silikon adalah unsur metaloid tetravalensi, bersifat lebih tidak reaktif dari pada karbon atau unsur non-logam yang tepat berada di bawah tabel periodik. Penelitian ini dilakukan untuk mengetahui sifat elektronik Silikon yang di-*doping* dengan Boron (Si), sifat elektronik Silikon diketahui dengan cara menganalisis dan menghitung *Electronic Band Structure* dan *Density Of State* (DOS) menggunakan metode komputasi *Density Functional Theory* (DFT) menggunakan perangkat lunak *Quantum Espresso*. Perhitungan dilakukan dengan *energy cut-off wave function* ($ecutwfc=40$ Ry) dan K-Point optimal 5 5 5, dimana hasil perhitungan tersebut diperoleh *electronic bands structure* yang menunjukkan bahwa tidak terdapat *band gap* atau *zero band gap*. Sedangkan perhitungan DOS terdapat tingkat energi yang melewati energi Fermi.

Kata Kunci: Silikon, *Density Functional Theory*, *Electronic Bands Structure*, *Density Of State*

PENDAHULUAN

Pada tahun 1824 silikon pertama kali dibuat dalam murninya dengan nama Silisium dari kata bahasa latin Silicis dengan akhiran ium yang berarti logam. Silikon yaitu bahan utama pembuatan komponen elektronika yang bersifat semikonduktor. Selain itu silikon banyak digunakan pada proses penyulingan baja, pengecoran aluminium dan beberapa proses industri lainnya (Krimmel & Siffert, 2013).

Semikonduktor adalah bahan yang memiliki nilai konduktivitas listrik yang berada diantara isolator dan konduktor, dan pada awalnya semikonduktor hanya terbuat dari bahan-bahan seperti Silikon (Si) seiring dengan kemajuan ilmu pengetahuan, nilai konduktivitasnya sebuah bahan semikonduktor dapat diatur sesuai dengan

kebutuhan melalui mekanisme *doping* (Huda et al., 2018).

Untuk menentukan sifat-sifat mikroskopik silikon khususnya sifat elektronik perlu dilakukan karakterisasi. Dalam penelitian ini akan dihitung *Band Structure* dan *Phonon Density of States* (DOS) dari silikon. *Band structure* berkaitan erat dengan penentuan sifat elektronik silikon. Penghitungan *band structure* dan DOS didapatkan melalui solusi persamaan *Schrodinger* untuk sistem banyak partikel (*Many Body System*). Interaksi antar partikel dalam sebuah sistem yang sangat rumit menyebabkan sulitnya menyelesaikan persamaan *Schrodinger* secara eksak. Pendekatan *Kohn and Sham* yang mensubstitusi interaksi yang rumit tersebut dengan interaksi satu ion dengan densitas elektron. Persamaan *Kohn-Sham* yang disempurnakan dari teorema

Hohenberg-Kohn adalah persamaan yang mendasari metode *Density Functional Theory*/Teori Fungsi Kerapatan. Dengan sebuah persamaan yang mirip dengan persamaan *Schrodinger* (Rahman & Purqon, 2015). Pembahasan mengenai sifat-sifat Silikon sangat dibutuhkan dalam memahami sifat dekomposisi material sehingga untuk mengetahui sifat-sifat dari silikon, khususnya sifat elektronik yang diperoleh dari studi teoritis dan eksperimen diperlukan analisis terhadap sifat elektronik silikon yang dilakukan dengan 2 perhitungan *Band Structure* dan *Density Of State (DOS)*. Untuk mendapatkan informasi secara detail mengenai struktur elektronik dari Silikon pada penelitian ini dilakukan perhitungan dengan menggunakan *Density Functional Theory (DFT)*.

METODE PENELITIAN

Jenis penelitian yang digunakan adalah penelitian berupa eksperimen komputasi, yaitu penelitian yang dilakukan di dalam komputer untuk meneliti sifat elektronik pada Silikon menggunakan *Software Quantum Espresso*.

1. Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian ini dilakukan di Laboratorium Komputasi Kampus II Universitas Cokroaminoto Palopo pada bulan Maret sampai bulan Juni 2022.

2. Prosedur Penelitian

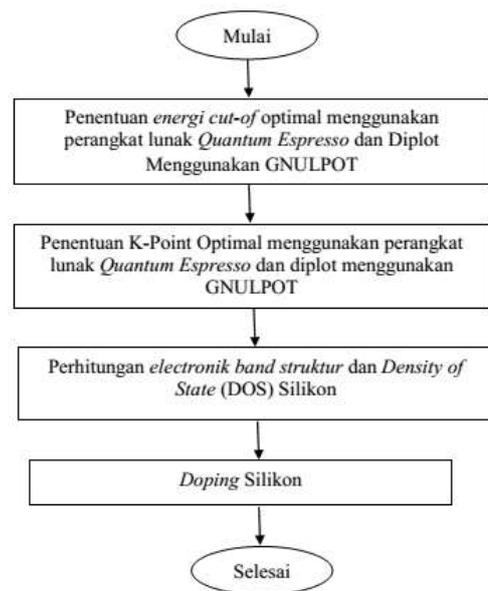
a. Alat dan Bahan

Dalam penelitian ini menggunakan alat yaitu komputer dan informasi struktur kristal Silikon. Perangkat lunak yang digunakan yaitu *Quantum Espresso (QE)* untuk perhitungan DFT dan GNULPOT dan VESTA untuk visualisasi (Quantum Espresso, 2018).

b. Prosedur Kerja

- 1) Studi literatur, penulis mengkaji berbagai referensi untuk memperoleh informasi terkait dengan material silikon.
- 2) Perhitungan, proses perhitungan menggunakan metode DFT yang disimulasikan dalam *Software Quantum Espresso*. *Input* dan hasil divisualisasikan

dengan menggunakan perangkat lunak VESTA dan GNUPLOT.



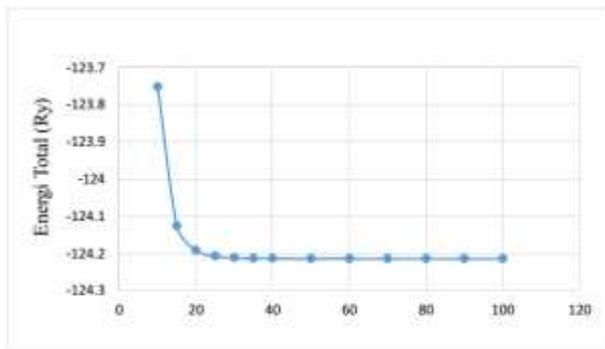
Gambar 1. Diagram alir penelitian

HASIL DAN PEMBAHASAN

Dengan menghitung kurva *electronic bands structure* dan *Density of States* Silikon tanpa di-doping dan yang di-doping dengan Boron dengan menggunakan perangkat lunak Vesta, kemudian menggunakan perangkat lunak *Quantum Espresso* pertama-tama kita menetapkan energi *cut-off wave function* ($ecutwfc=40$) dan resolusi *K-Point* yang konvergen. Setelah mendapatkan nilai tersebut maka akan dilanjutkan ke perhitungan *electronic band structure* dan *Density of States* dari Silikon murni dan yang di-doping dengan Boron.

Energi cut-off wave function ($ecutwfc$) merupakan batasan energi yang digunakan untuk mewakili ekspansi dari fungsi gelombang. Untuk menetapkan nilai energi *cut-off wave function* ($ecutwfc$) optimal Silikon dilakukan dengan cara menginput angka secara acak dan dipastikan dalam deretan angka tersebut *energy cut-off* teori ($ecutwfc=40$) ada didalamnya yang merupakan posisi *ground state Ecut off* Silikon. Setelah mendapatkan energi total dari setiap *output energy cut-off* maka langkah selanjutnya yaitu membuat grafik perbandingan energi *cut-off* dengan energi totalnya. Setelah grafik

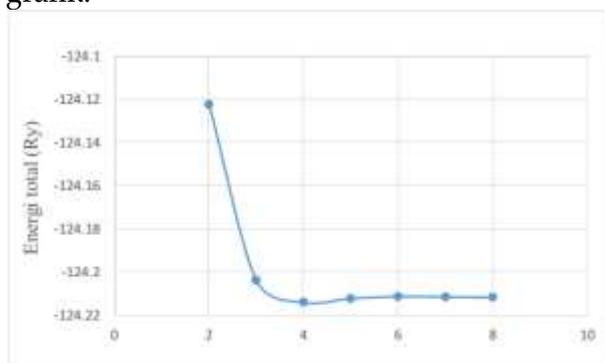
terbentuk maka kita mengecek posisi nilai *ecutwfc* teori di dalam grafik.



Gambar 2. Grafik *ecutwfc* vs energi total

Grafik di atas memperlihatkan perbandingan *Energi Cut-off Wave Function* dengan energi total. Dari hasil di atas dapat dilihat bahwa nilai energi total mulai konvergen pada *energi cut* 40 Ry dan digunakan untuk perhitungan selanjutnya.

K-Point yaitu berupa angka atau huruf-huruf, untuk mendapatkan nilai *K-Point* optimal dilakukan dengan cara menginput angka secara acak dan dipastikan didalam deretan angka tersebut ada *K-Point* yang konvergen (*K-Point* = 5x5x5) ada di dalamnya yang merupakan posisi *ground state K-Point* Silikon dan Boron. Setelah mendapatkan energi total dari setiap *output K-Point*, maka langkah selanjutnya adalah membuat grafik perbandingan *K-Point* dengan energi totalnya. Setelah grafik terbentuk maka kita menetapkan posisi nilai *K-Point* teori di dalam grafik.

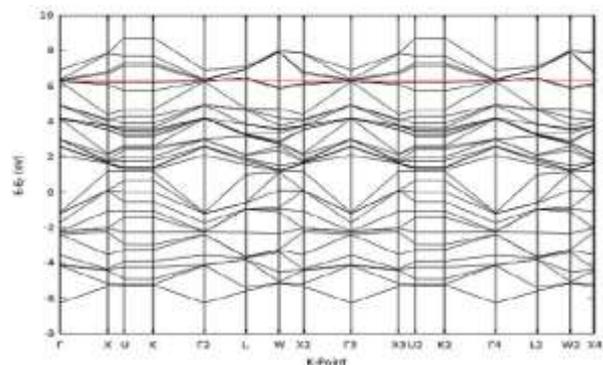


Gambar 3. Grafik *K-Point* vs energi total

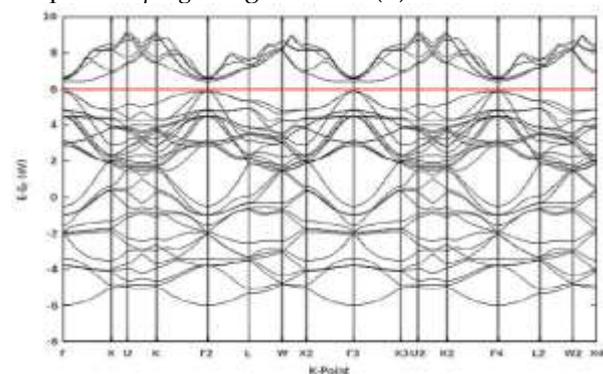
Grafik di atas memperlihatkan perbandingan *K-Point* dengan energi total. Dari hasil di atas energi total terlihat lurus mulai dari *K-Point* = 5x5x5, dari hal ini dapat

disimpulkan bahwa *K-Point* yang konvergen adalah *K-Point* = 5x5x5 disimpan untuk melakukan perhitungan selanjutnya.

Perhitungan *scf* dan *nscf* dilakukan menggunakan nilai optimal *e-cut* dan nilai optimal *K-Point*, selain itu juga dilakukan perhitungan untuk menentukan *K-Point* kristal dengan memasukkan *High-symmetry points*. Hasil perhitungan tersebut yang akan menjadi patokan untuk perhitungan *electronic band structure*, maupun *Density Of State (DOS)*. *Output electronic band structure* yang dihasilkan menggunakan perangkat lunak GNUPLOT *Electronic band structure* ini digunakan untuk menunjukkan beberapa ciri material, terutama sifat elektronik dan optik material tersebut.



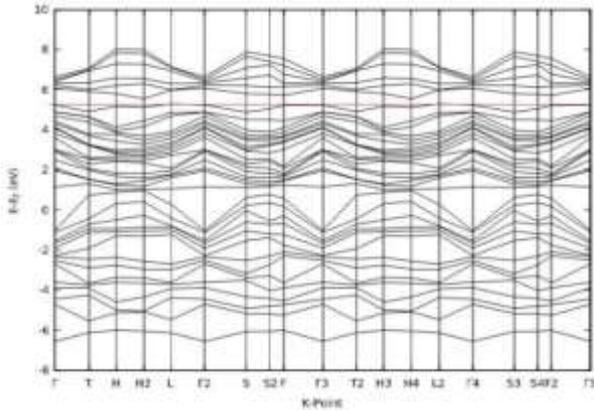
Gambar 4. *Electronic bands structure* Silikon (Si) tanpa di-doping dengan Boron (B)



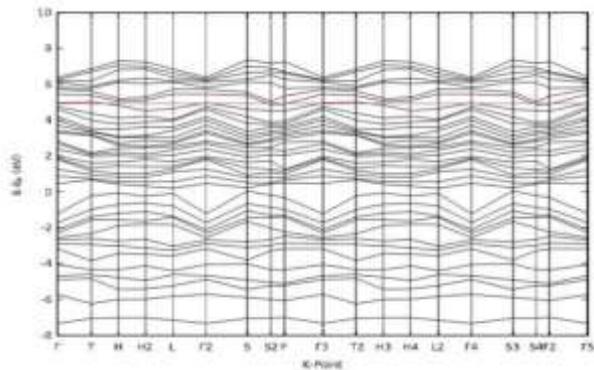
Gambar 5. *Electronic bands structure* Silikon (Si) di-doping dengan Boron (B=1)

Gambar *electronic bands structure* Silikon dengan keempat pemodelan yang berbeda tersebut menunjukkan keadaan *zero band gap* (tidak terdapat celah pita), sehingga tidak terdapat daerah terlarang dimana elektron mampu melewatinya hal ini dapat dilihat dari keadaan pita energi yang ditunjukkan pada

gambar kurva *electronic bands structure* dengan memperhatikan energi fermi yang ada.



Gambar 6. *Electronic bands structure* Silikon (Si) di-doping dengan Boron (B=2)



Gambar 7. *Electronic bands structure* Silikon (Si) di-doping dengan Boron (B=3)

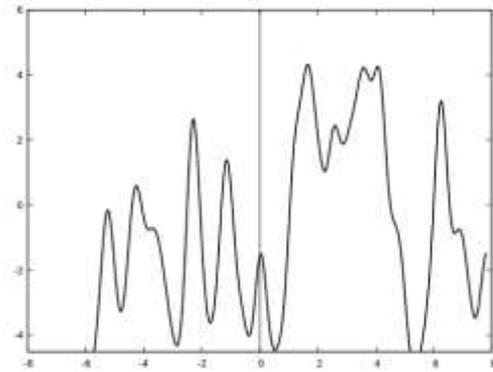
Pita energi terdapat dua jenis yaitu pita valensi yang berada dibawah level atau tingkat energi fermi dan pita konduksi yang berada diatas tingkat energi fermi. Pita valensi merupakan tempat dimana elektron dapat melompat keluar ketika atom tereksitasi sedangkan pita konduksi adalah pita orbital elektron.

Tabel 1. Perbandingan *energi Fermi* untuk masing-masing *doping* dan perbandingan *energi gap*

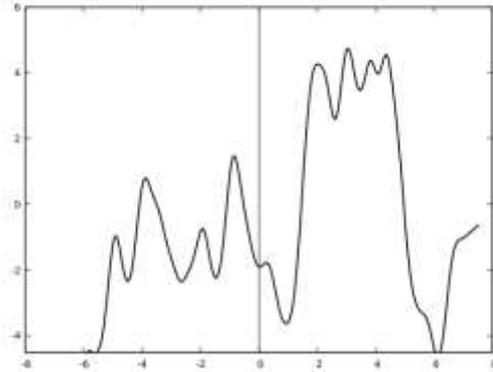
| No | Kurva elektronik <i>bands structure</i> | <i>Energi Fermi</i> | <i>Energi Gap</i> |
|----|--|---------------------|-------------------|
| 1. | Silikon tanpa <i>doping</i> | 6.7558 | 1,0 ev |
| 2. | Silikon di- <i>doping</i> dengan Boron (B=1) | 5.9880 | 1,2 ev |
| 3. | Silikon di- <i>doping</i> dengan Boron (B=2) | 5.4706 | 1,1 ev |
| 4. | Silikon di- <i>doping</i> dengan Boron (B=3) | 5.2111 | 1,1 ev |

Untuk menghitung *Density Of States* (DOS) dimulai dengan nilai *self consistent* dan *nscf* yang telah konvergen. Setelah didapatkan hasilnya, maka dilanjutkan dengan menghitung *Input file dos* yang akan menghasilkan *Output* berupa data *dos*. *Output*

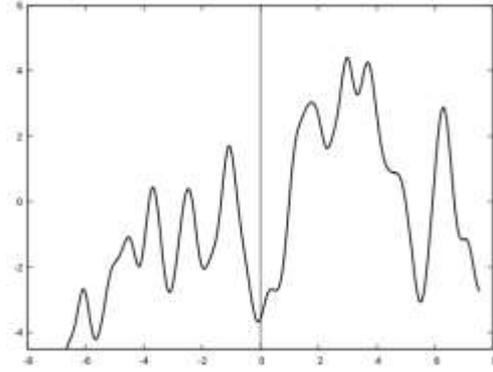
yang telah dihasilkan akan diplot menggunakan perangkat lunak GNUPLOT.



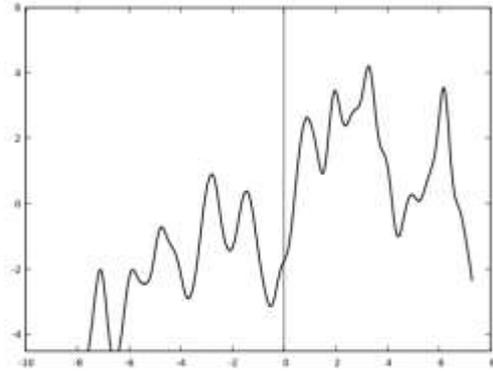
Gambar 8. *Density Of States* Silikon (Si) tanpa di-doping dengan Boron (B)



Gambar 9. *Density Of States* Silikon (Si) di-doping dengan Boron (B=1)



Gambar 10. *Density Of States* Silikon (Si) di-doping dengan Boron (B=2)



Gambar 11. *Density Of States* Silikon (Si) di-doping dengan Boron (B=3)

Density Of States (DOS) seluruh jumlah keadaan elektron pada setiap tingkat energi dari perhitungan *band structure* yang dinyatakan dalam DOS. Gambar kurva DOS Silikon tanpa di-*doping* dengan Boron dan Silikon di-*doping* dengan Boron memiliki hasil yang berbeda, maka menunjukkan bahwa keempatnya tidak memiliki celah antara valensi dan pita konduksi (*zero band gap*) dengan energi Fermi yang berbeda.

Hasil perhitungan pita energi dengan menggunakan metode *Density Functional Theory* dilakukan dengan empat model kurva dimana pada model pertama dilakukan perhitungan *band structure* tanpa *doping* dengan energi Fermi 6.7558 eV. Pada model kedua dilakukan perhitungan *band structure* yang di-*doping* dengan menambahkan Boron (B=1) energi Fermi 5.9880 eV, sedangkan pada model ketiga dilakukan perhitungan yang di-*doping* dengan menambahkan Boron (B=2) memiliki energi Fermi 5.4706 eV, dan pada model keempat perhitungan *bands structure* sama seperti dengan model kedua dan ketiga dengan menambahkan Boron (B=3) dengan energi Fermi 5.2111 eV. Keempat model koreksi yang berbeda ini memiliki energi Fermi yang juga berbeda, yaitu menurun sesuai dengan penambahan Boron.

Selain itu pada kurva dapat terlihat perbedaan, yaitu pada model *electronic bands structure* gambar 5 dan *electronic bands structure* gambar 6 lebih padat dibandingkan dengan *electronic bands structure* gambar 4 dan gambar 7 yang disebabkan karena *band symmetry electronic bands structure* gambar 4 dan gambar 7 lebih besar yakni sebesar -5.885 eV dibandingkan dengan *band symmetry* gambar 5 dan gambar 6 yakni sebesar -24.675 eV. Pada struktur pita elektronik ini terdapat *dirac cone* atau titik pertemuan antara pita valensi dan pita konduksi. *Dirac point* ini menunjukkan bahwa Silikon memiliki interaksi elektron-elektron yang menginduksi fase semimetal.

Silikon murni dan Silikon yang di-*doping* dengan Boron memiliki gambar yang berbeda dimana pada grafik *Density Of States* (DOS) Silikon murni pada gambar 8

menunjukkan didapatkan *band gap* 1,0 eV. Hal ini dapat dijadikan indikasi bahwa Silikon murni bersifat non-magnetik. Besaran lain yang dapat dijadikan acuan dalam mengamati sistem magnetik dalam Silikon murni adalah sistem feromagnetik. Sedangkan pada grafik *Density Of States* (DOS) Silikon yang di-*doping* dengan Boron pada gambar 9 memiliki *band gap* 1,5 eV. Pada gambar 10 memiliki *band gap* 1,3 eV dan gambar 11 memiliki *band gap* 1,2 eV. Jadi selisih *band gap* Silikon murni dan Silikon yang di-*doping* dengan Boron adalah -3 eV. Selisih data tersebut terdapat tingkat energi yang menunjukkan sifat logam.

Hasil perhitungan *Electronic bands structure* dan *Density of state* dapat diketahui bahwa sifat elektronik Silikon yang di-*doping* dengan Boron adalah semikonduktor tipe-p karena bahan *doping*-nya adalah bahan *trivalent* yaitu unsur dengan ion yang memiliki 3 elektron pada pita valensi. Karena ion Silikon memiliki 4 elektron, dengan demikian ada ikatan kovalen *hole* yang menggambarkan sebagai akseptor yang siap menerima elektron.

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil penelitian dapat disimpulkan bahwa sifat elektronik Silikon dan Boron dapat diketahui dengan menggunakan gambaran *electronic bands structure* serta *Density Of States* (DOS). Silikon dan Boron tidak memiliki celah antara pita valensi dan pita konduksi (*Zero band gap*) baik pada keempatnya model *bands structure* dan *Density Of States* (DOS) dengan energi Fermi dan Celah energi yang berbeda. Dimana pada kurva *bands structure* Silikon tanpa *doping* memiliki energi Fermi 6.7558 eV, Silikon di-*doping* dengan Boron (B=1) 5.9880 eV, (B=2) 5.4706 eV, (B=3) 5.2111 eV. Sedangkan pada *Density Of States* memiliki selisih *band gap* -3 eV.

UCAPAN TERIMA KASIH

Ucapan terima kasih kami ucapkan kepada Pimpinan Fakultas Sains yang telah memberikan izin menggunakan Laboratorium Komputasi.

DAFTAR PUSTAKA

- Huda, A., Handoko, C. T., Bustan, M. D., Yudono, B., & Gulo, F. (2018). New route in the synthesis of Tin (II) oxide micro-sheets and its thermal transformation. *Materials Letters*, 211, 293-295.
- Quantum Espresso. (2018). QUANTUM ESPRESSO: *QUANTUM ESPRESSO Foundation*.
- Rahman, I. A., & Purqon, A. (2015). Studi Density Functional Theory (DFT) dan Aplikasinya Pada Perhitungan Struktur Elektronik Monolayer MoS₂. *Prosiding SKF*, 497-503.
- Siffert, P., & Krimmel, E. (Eds.). (2013). *Silicon: evolution and future of a technology*. Springer Science & Business Media.