

# MAKALAH SEMINAR

## ADSORPSI ATOM SILIKON PADA PERMUKAAN GRAFENA DENGAN METODE AM 1 MENGGUNAKAN PAKET HYPERCHEM

*Oleh :*

**IMELDA**



**Jurusan Kimia  
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam  
Universitas Andalas  
Padang  
2010**

Diseminarkan pada Seminar dan Rapat Tahunan BKS-PTN Indonesia Bagian Barat Bidang MIPA tanggal 10 – 11 Mei 2010 di Pekanbaru

# ADSORPSI ATOM SILIKON PADA PERMUKAAN GRAFENA DENGAN METODE AM 1 MENGGUNAKAN PAKET HYPERCHEM

Imelda, M.Si. Prof.Dr. Theresia Sita Kusuma, Hayatil Khairy Yarza  
Laboratorium Kimia Komputasi Jurusan Kimia FMIPA Unand Padang  
imeldai@ymail.com

## ABSTRAK

Adsorpsi atom Silicon pada permukaan grafena ( $C_{24}$ ) dipelajari dengan paket Hyperchem dengan metode AM 1. Program ini dijalankan dengan Computer Intel Pentium IV Processor 2.66 GHz yang memorinya 256 MB RAM. Hasil perhitungan memperlihatkan setiap atom Silicon yang mendarangi lapisan grafena diserap oleh atom karbon membentuk kompleks permukaan Si dengan posisi C-Si jembatan *tilted* dan jembatan *lyingdown* terhadap lapisan dan ada pula atom atau atom-atom silicon yang dilepas, yaitu berupa : Si, Si<sub>2</sub>, Si<sub>3</sub>. Energi ikatan system dari kompleks ini berkisar antara (-3330,0871)-(-4966,1832) kkal/mol. Untuk energy ikatan (Si<sub>n</sub>)/n berkisar antara -11,3694 – 151,4067 kkal/mol. Adsorpsi Silicon pada permukaan grafena menurunkan energy celah permukaan tersebut dari 7,0788 eV menjadi 6,5292 – 4,2761 eV, pada permukaan grafena dengan penjujukan sisi aktif dengan atom Si sebesar 50% ( $C_{24}Si_5$ ) juga terjadi penurunan energy celah permukaan dari 6,3321 eV menjadi 6,1647 – 4,4685 eV dan pada permukaan grafena dengan penjujukan sisi aktif dengan atom Si sebesar 100% ( $C_{24}Si_{12}$ ) juga menurunkan energy celah permukaan tersebut dari 4,8828 menjadi 4,8613 – 3, 9135 eV

*Kata kunci:* Komputasi, Grafena, Silicon, Hyperchem, AM 1

## I. PENDAHULUAN

Grafit merupakan senyawa karbon yang mempunyai struktur lapisan. Berbagai macam spesies kimia dapat dimasukkan/diserap oleh lapisan ini. Namun perlu diketahui bahwa daya adsorpsi grafit terhadap bermacam spesies kimia berbeda-beda. Perbedaan ini disebabkan perbedaan sifat dasar masing-masing spesies untuk membentuk ikatan dengan C (grafit). Untuk mengetahui daya adsorpsi grafit terhadap atom silicon, maka perlu diketahui energy ikatan dan panjang ikatan antara grafit dengan atom tersebut karena C dan Si segolongan dan kelimpahan di alam cukup besar, diduga grafit dapat mengadsorpsi Si dengan baik. Dalam hal ini, untuk penentuan energy ikatan dan panjang ikatan digunakan suatu metode komputasi menggunakan paket Hyperchem<sup>1</sup>.

Pada penelitian ini digunakan grafena sebagai pengadsorpsinya. Grafena adalah kumpulan atom karbon membentuk satu lapisan planar dalam bentuk dua dimensi seperti kisi-kisi lebah, dan dijadikan bentuk dasar yang membangun material grafit untuk berbagai dimensi<sup>2</sup>.

Berdasarkan latar belakang diatas maka dilakukan penelitian dengan tujuan melihat interaksi atom silicon pada permukaan grafena dengan paket Hyperchem menggunakan AM 1 dan mengetahui hubungan posisi penjatuhan atom silicon pada grafena dengan  $\Delta E$  system.

## II. TINJAUAN PUSTAKA

Grafena adalah nama yang diberikan untuk suatu kumpulan atom karbon yang membentuk satu lapisan planar yang rapat sehingga dikategorikan ke dalam struktur dua dimensi seperti kisi-kisi sarang lebah, dan dijadikan sebagai suatu bentuk dasar yang membangun material grafit untuk berbagai dimensi.

Paket Hyperchem berisi pemodelan molecular dan program simulasi untuk melakukan perhitungan kimia kompleks. Hyperchem menyediakan beberapa metode perhitungan dan diantaranya adalah AM1<sup>3</sup>. AM 1 atau singkatan dari Austin Model 1, adalah metode semi empiris untuk perhitungan kuantum dari struktur elektronik molecular dalam kimia komputasi. Metode ini didasarkan pada pengabaian perkiraan integral dari overlap differensial diatomic. Khususnya, metode ini digunakan untuk memodifikasi perkiraan dari overlap differensial diatomik<sup>4</sup>.

## III. METODE PENELITIAN

### Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan mulai Februari sampai juni 2007 di Laboratorium Komputasi Jurusan kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Andalas

### Alat yang digunakan

Alat yang digunakan adalah Seperangkat computer Intel Pentium IV Processor 2.66 GHz, 256 MB RAM, Printer HP Deskjet 3920 dan Compact Disc Paket Hyperchem Pro 6.0 (Metode AM 1).

### Metode Kerja

Pada penelitian ini grafena digunakan sebagai substrat yang akan menyerap atom-atom silicon. Grafena ini terdiri dari beberapa atom karbon yang tersusun rapat membentuk 7 cincin, dengan rumus molekul  $C_{24}$ . Grafena ini dibuat dengan panjang ikatan C-C 1,416 Å. Permukaan grafena setelah dioptimasi dengan program Hyperchem dengan metode perhitungan AM 1, diperoleh permukaan grafena seperti pada Gambar 1. Permukaan grafena inilah yang akan dijatuhi dengan

atom-atom silicon. Kemudian grafena dalam keadaan optimal ini dijenuhkan dengan silicon dengan penjenuhan sisi aktif 50% ( $C_{24}Si_6$ ) dan dengan penjenuhan sisi aktif 100% ( $C_{24}Si_{12}$ ) dengan panjang ikatan C-Si 1,2 Å. Baik  $C_{24}Si_6$  maupun  $C_{24}Si_{12}$  dioptimalkan pula dengan metode AM 1. Selanjutnya atom-atom Si didatangkan pada permukaan  $C_{24}$ ,  $C_{24}Si_6$ ,  $C_{24}Si_{12}$  yang sudah dioptimalkan. output data berupa  $\Delta E$  (energy gap) dan BE (*Binding Energy*).

$$\Delta E = E_{HOMO} - E_{LUMO}$$

$$BE (Si_{ad}) = \underline{BE (grafena awal) - BE (Molekul yang telah dioptimasi)}$$

Dimana:

n

BE ( $Si_{ad}$ ) = Binding energy atom silicon yang dijatuhkan pada permukaan grafena

BE Molekul yang telah dioptimasi = binding energy system grafena dengan n  $Si_{ad}$  dalam keadaan optimal

n = Jumlah  $Si_{ad}$  yang mendatangi permukaan grafena

#### IV. HASIL DAN PEMBAHASAN

Energi total permukaan  $C_{24}$  optimal (grafena tanpa penjenuhan) adalah -70160,0668 kcal/mol dengan  $\Delta E = 7,0788$  eV dan BE = -3292,7602 kcal/mol, sedangkan untuk energy total permukaan  $C_{24}Si_6$  optimal (grafena dengan penjenuhan sisi aktif 50%) adalah -81983,0471 kcal/mol dengan  $\Delta E = 6,3321$  eV dan BE = -4184,5498 kcal/mol. Energi total permukaan  $C_{24}Si_{12}$  optimal (grafena dengan penjenuhan sisi aktif 100%) adalah -93383,5946 kcal/mol dengan  $\Delta E = 4,8828$  eV dan BE = -4653,9065 kcal/mol.

Posisi jatuh atom Si adalah posisi on top dengan sudut penjatuhan  $90^\circ$ , bridge (jembatan dua) dan hollow. Jarak C-Si untuk posisi on top = 1,2 Å; posisi jembatan dua = 1,2 Å; posisi hollow = 1,5 Å. Semua permukaan grafena masing – masing dijatuhkan 1 sampai 6 atom silicon. Pada grafena ( $C_{24}$ ), atom C dibagi atas tiga kelompok, yaitu atom C kelompok 1, 2 dan 3. Pengelompokan ini didasarkan pada Net Charge (muatan) masing-masing atom pada molekul Grafena ( $C_{24}$ ).

##### a. Adsorpsi Silikon Pada Permukaan Grafena Tanpa Penjenuhan ( $C_{24}$ )

Dari beberapa posisi penjatuhan atom silicon pada permukaan grafena, didapatkan bahwa penyerapan silicon oleh grafena berstruktur jembatan dua, tilted, dimana atom silicon tegak pada lapisan grafena (gambar 2). Disini atom Si yang dijatuhkan ke  $C_3$  (C kelompok 1) secara tegak lurus berdifusi ke  $C_3$  dan  $C_{12}$  (C kelompok 2), jembatan dua, tilted, dengan nilai BE = -3368,9767 kcal/mol; nilai BE ( $Si_{ad}$ )/n = 76,2165 kcal/mol; dan  $\Delta E = 5,5818$  eV.

Untuk penjatuhan atom silicon lainnya didapatkan bahwa penyerapan silicon oleh grafena berstruktur jembatan dua, lyingdown, dimana atom silicon posisi tidur pada lapisan

grafena (gambar 3). Disini memperlihatkan bahwa atom Si yang dijatuhkan ke C9 (C kelompok 3) secara tegak lurus berdifusi ke C9 dan C11 (C kelompok 3). Dengan nilai BE = -3444,1668 kcal/mol; nilai BE (Si<sub>ad</sub>)/n = 151,4066 kkal/mol; dan ΔE = 6,5292 eV.

Hal lain yang terjadi pada penjatuhan atom silicon yaitu penyerapan silicon oleh grafena berstruktur jembatan satu, tilted, dimana atom silicon tegak pada lapisan Grafena (Gambar 4). Atom Si yang dijatuhkan ke C<sub>17</sub>, C<sub>18</sub>, C<sub>19</sub>, C<sub>22</sub>, C<sub>23</sub>, C<sub>24</sub> (C kelompok 3) mempunyai nilai BE = -3985,3635 kcal/mol; nilai BE (Si<sub>ad</sub>)/n = 115,4339 kcal/mol; dan ΔE = 5,1058 eV.

Posisi berikutnya yang terjadi pada penjatuhan atom silicon yaitu penyerapan silicon oleh grafena berstruktur jembatan satu, lyingdown, dimana atom silicon posisi tidur pada lapisan grafena (Gambar 5). Atom Si yang dijatuhkan ke C<sub>10</sub>, C<sub>14</sub>, C<sub>18</sub>, C<sub>22</sub> (C kelompok 3) mempunyai nilai BE = -3763,8730 kkal/mol; nilai BE (Si<sub>ad</sub>)/n = 117,7782 kcal/mol; dan ΔE = 5,2797 eV.

Posisi lain yang terjadi pada penjatuhan atom silicon yaitu penyerapan silicon oleh grafena berstruktur jembatan dua, tilted, dimana atom silicon tegak pada lapisan grafena dengan melewati tiga atom (Gambar 6) ini terjadi dikarenakan penjatuhan atom Si secara berselang pada C kelompok 3. Atom Si yang dijatuhkan ke C<sub>15</sub>, C<sub>16</sub>, C<sub>18</sub>, C<sub>22</sub> (C kelompok 3) secara tegak lurus akan berdifusi ke C<sub>11</sub> - C<sub>15</sub>, C<sub>14</sub> - C<sub>16</sub>, C<sub>10</sub> - C<sub>18</sub>, C<sub>22</sub> - C<sub>24</sub> (C kelompok 3) mempunyai nilai BE = -3842,3288 kcal/mol; nilai BE (Si<sub>ad</sub>)/n = 137,3921 kcal/mol; dan ΔE = 4,8717 eV.

Tidak semua atom-atom silicon yang dijatuhkan pada permukaan grafena dapat diserap, sebagian atom-atom silicon itu dilepas (tidak diikat). Atom-atom silicon yang lepas itu ternyata membentuk ikatan sesamanya. Hal ini terjadi pada penjatuhan dua atom silicon pada permukaan grafena pada posisi on top yang dijatuhkan ke C<sub>3</sub> dan C<sub>5</sub> (C kelompok 1). Pada posisi ini terjadi pemutusan ikatan C-Si. Pemutusan ikatan C-Si ini dapat terlihat dari panjang ikatan C-Si yang terbentuk setelah dilakukan optimasi melebihi 2,8 Å. Setelah ditentukan jarak Si-Si yang dilepas, didapatkan bahwa Si-Si ini membentuk ikatan dengan panjang ikatan 1,6848 Å (Gambar 7a) mempunyai nilai BE = -3367,9012 kcal/mol; nilai BE (Si<sub>ad</sub>)/n = 37,5705 kcal/mol; dan ΔE = 5,7517 eV. Hal ini juga terjadi pada penjatuhan tiga atom silicon pada permukaan grafena dengan posisi tegak dimana ketiga atom silicon ini dijatuhkan pada atom C kelompok 1. Pada kasus ini, tidak semua atom silicon yang dilepas, tetapi hanya satu atom, dapat terlihat dari panjangnya panjang ikatan C-Si yang terbentuk setelah dilakukan optimasi (melebihi 6 Å) sedangkan 2 atom lainnya terikat pada C<sub>10</sub> dan C<sub>14</sub> pada permukaan grafena (Gambar 7b) mempunyai nilai BE = -3584,3246 kcal/mol; nilai BE (Si<sub>ad</sub>)/n = 97,1881 kcal/mol; dan ΔE = 5,9679 eV.

Sistem yang mempunyai nilai BE paling tinggi dari semua posisi yang diteliti adalah pada posisi hollow C<sub>7</sub> - C<sub>4</sub> (C kelompok 1) dengan BE system (-3330,0871) kcal/mol

(Gambar 8a) dan BE system yang mempunyai nilai paling rendah dari semua posisi adalah penjatuhan pada posisi tegak dengan BE system (-4195,2205) kcal/mol (Gambar 8b). Adsorpsi silikon pada permukaan grafena tanpa penjenuhan (C<sub>24</sub>) ini menurunkan energy celah permukaan tersebut dari 7,0788 eV menjadi 4,2761 – 6,5292 eV (isolator).

Ada beberapa penjatuhan atom-atom silikon yang menyebabkan terjadinya difusi seperti : difusi dari C kelompok 1 ke C kelompok 1 lainnya (Gambar 8a), dari C kelompok 1 ke C kelompok 2 (Gambar ), dari C kelompok 1 ke C kelompok 3 (Gambar 9), dari C kelompok 2 ke C kelompok 3 (Gambar 19). Dan dari penjatuhan satu atom dengan posisi tegak ke C kelompok 3 berdifusi ke C kelompok 3 lainnya membentuk jembatan 2 ( Gambar ).

Pada penelitian ini adsorpsi atom silikon pada permukaan grafena ( $\Delta E$  berkisar 7 eV didapatkan posisi jembatan membentuk empat ikatan dengan atom C tetapi dari dua ikatan tersebut cukup lemah dengan panjang ikatan C-Si 2,8201 Å dan 2,8203 Å sehingga lebih cenderung disebut berdifusi ke hollow C<sub>3</sub> – C<sub>4</sub> membentuk dua ikatan dengan atom C ( Gambar 8a).

Dilihat dari panjang ikatan yang terbentuk antara C-Si (1,6860 – 2,0797 Å), dapat dikatakan bahwa jenis adsorpsi yang terjadi pada permukaan grafena terhadap atom-atom silikon bersifat kimia (adsorpsi kimia).

#### b. Adsorpsi Silikon Pada Permukaan Grafena yang Dijenuhkan dengan Silikon dengan Penjenuhan Sisi Aktif 50 % (C<sub>24</sub>Si<sub>6</sub>)

Penjatuhan atom silikon pada permukaan grafena dengan penjenuhan sisi aktif dengan atom Si sebesar 50 % juga didapatkan penyerapan silikon oleh grafena berstruktur jembatan dua, tilted (Gambar 10a). Atom Si yang dijatuhkan ke C<sub>1</sub> (C kelompok 1) secara tegak lurus berdifusi ke C<sub>1</sub> dan C<sub>7</sub> (C kelompok 2). Dengan nilai BE = -4211,0254 kcal/mol; nilai BE (Si<sub>ad</sub>)/n = 26,4756 kcal/mol; dan  $\Delta E = 6,3353$  eV.

Atom Si yang dijatuhkan ke hollow C<sub>1</sub> – C<sub>2</sub> (C kelompok 1) berdifusi ke hollow C<sub>3</sub> – C<sub>4</sub> (C kelompok 1). Dengan nilai BE = -4199,7930 kcal/mol; nilai BE (Si<sub>ad</sub>)/n = 15,2432 kcal/mol; dan  $\Delta E = 6,1647$  eV (Gambar 10b).

Hal ini juga terjadi pada C<sub>24</sub> (Gambar dan Gambar 8a). Bila dibandingkan nilai BE (Si<sub>ad</sub>)/n untuk semua posisi penjatuhan atom silikon pada C<sub>24</sub>Si<sub>6</sub> lebih kecil dari pada C<sub>24</sub>, hal ini terjadi karena telah cukup banyak atom silikon yang diadsorpsi oleh permukaan grafena.

Pada umumnya penjatuhan atom silikon pada permukaan grafena dengan penjenuhan sisi aktif dengan atom Si sebesar 50 % berstruktur jembatan satu, tilted dan terjadi berbagai macam difusi yaitu : dari C kelompok 1 ke C kelompok 1 lainnya (Gambar 11a), dari C kelompok 1 ke C kelompok 2 (Gambar 11 b) dan dari C kelompok 1 ke C kelompok 3 (Gambar 21 c).

Empat atom Si yang dijatuhkan pada permukaan tidak semuanya diserap tetapi ada dua atom silicon yang dilepas (panjang ikatan C-Si setelah dilakukan optimasi melebihi 3 Å). Tidak membentuk molekul Si<sub>2</sub> karena jarak Si – Si yang cukup jauh. Dan 2 atom lainnya terikat pada C<sub>4</sub> – C<sub>13</sub> dan C<sub>5</sub> – C<sub>20</sub> membentuk struktur jembatan dua, tilted (Gambar 12) mempunyai nilai BE = -4371,8855 kkal/mol; nilai BE (Si<sub>3d</sub>)/n = 46,8339 kkal/mol; dan ΔE = 5,9954 eV.

**c. Adsorpsi Silikon Pada Permukaan Grafena yang Dijenuhkan dengan Silikon dengan Penjenuhan Sisi Aktif 100 % (C<sub>24</sub>Si<sub>12</sub>)**

Permukaan grafena yang telah dijenuhkan sisi aktifnya sebesar 100 % dengan atom silicon, apabila dijatuhkan atom silicon kembali, permukaan ini tidak dapat mengikat lagi (melepaskan) atom silicon. Hal ini disebabkan karena permukaan tersebut telah jenuh dengan atom –atom Si sehingga apabila atom silicon dijatuhkan kembali atom Si tersebut akan lepas berupa 1 atom Si (Gambar 13a), 2 atom Si (Gambar 13b) atau 4 atom Si (Si<sub>4</sub>) (Gambar 13c) dengan jarak atom Si – Si berkisar 1,8023 – 2,3852 Å.

Permukaan grafena dengan penjenuhan sisi aktif dengan atom Si sebesar 100 %, semua hasil optimasi membentuk mangkok (Gambar 24) karena penjenuhan dilakukan pada sisi aktif dan seluruh atom si dijatuhkan secara serentak dengan posisi tegak pada permukaan C kelompok 3.

Dari semua data didapat nilai ΔE berkisar antara 3,9135 – 6,5292 eV sehingga semua system atom Si yang mendatangi permukaan masih bersifat isolator tetapi telah cukup besar bergeser kearah semikonduktor, hal ini disebabkan karena grafena memiliki nilai ΔE = 7,0788 eV.

Bila membandingkan nilai BE (Si<sub>3d</sub>)/n untuk semua posisi penjatuhan atom silicon, didapatkan korelasi bahwa BE (Si<sub>3d</sub>)/n C<sub>24</sub>Si<sub>6</sub> < C<sub>24</sub>Si<sub>12</sub> < C<sub>24</sub>. Ada beberapa pengecualian, misalnya penjatuhan empat atom Si pada permukaan C<sub>24</sub>Si<sub>12</sub> (Gambar 13) ini mempunyai nilai BE (Si<sub>3d</sub>)/n lebih besar dibandingkan dengan penjatuhan empat atom Si pada permukaan C<sub>24</sub>, hal ini dikarenakan adanya molekul Si<sub>4</sub> yang dilepas, contoh pengecualian lain yaitu penjatuhan satu atom Si pada permukaan C<sub>24</sub>Si<sub>12</sub> dengan posisi hollow (Gambar 23a) mempunyai nilai BE (Si<sub>3d</sub>)/n lebih kecil dibandingkan dengan penjatuhan atom Si pada permukaan C<sub>24</sub>Si<sub>6</sub> dengan posisi yang sama, karena tidak ada Si yang diserap oleh permukaan, dan penjatuhan tiga atom Si dengan posisi on top pada permukaan C<sub>24</sub>Si<sub>12</sub> (Gambar 15) mempunyai nilai BE (Si<sub>3d</sub>)/n lebih kecil dibandingkan dengan penjatuhan atom Si pada permukaan C<sub>24</sub>Si<sub>6</sub> dengan posisi yang sama. Hal ini terjadi karena adanya 1 atom Si dan 1 molekul Si<sub>2</sub> yang tidak diikat.

Dari ketiga posisi yang diteliti posisi hollow (Gambar 13a) dan (Gambar 8a) memiliki nilai BE (Si<sub>3d</sub>)/n paling kecil dibandingkan dengan posisi on top dan jembatan dua.

## V. KESIMPULAN

Dari hasil data yang telah diuraikan didapatkan kesimpulan bahwa adsorpsi atom silicon pada permukaan grafena dapat menurunkan energy celah dari 7,0788 eV menjadi 6,5292 – 3,9135 eV . Atom- atom Si dapat berdifusi dari C kelompok 1 ke C kelompok 1 lainnya ,2 dan 3; dari C kelompok 2 ke C kelompok 3 dan dari kelompok 3 ke C kelompok 3 lainnya. Ada atom silicon yang diserap oleh permukaan dan ada pula atom silicon yang dilepas, yaitu berupa : Si, Si<sub>2</sub>, Si<sub>4</sub>.

## VI. DAFTAR PUSTAKA

1. H. Tachikawa. *Diffusion Dynamics of the Li Ion on a Model Surface of Amorphous Carbon: A direct Molecular Orbital Dynamics Study*. J. Phys. Chem B.109.No.27.2005.Hal 13255 – 13362.
2. A.K.Geim and K.S.Novoselov. *The Rise of Graphene*. Nature Materials. Vol 6. 2007. Hal 183 – 190.
3. N. Allinger. *Hyperchem Release 5.0 for Windows Reference Manual*. Hypercube, Inc, Canada. 1996. Hal 1 – 3, 204 -211.
4. M.J.S. Dewar, et.al. *AM 1 : A New General Purpose Quantum Mechanical Molecular Model*. J. Am. Chem Soc. American Chemical Society. 1984. Hal 183 – 190.