

**ADSORPSI ATOM SILIKON PADA PERMUKAAN GRAFENA DENGAN
METODE AM1**



Oleh :

HAYATIL KHAIRY YARZA
No. BP 03132055



JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2007

ABSTRAK

ADSORPSI ATOM SILIKON PADA PERMUKAAN GRAFENA DENGAN METODE AM1

Oleh

HAYATIL KHAIRY YARZA

Sarjana Sains (S.Si) dalam Bidang Kimia Fakultas MIPA Universitas Andalas Dibimbing oleh Prof. Dr. Theresia Sita Kusuma, M.Sc dan Imelda, M.Si

Adsorpsi atom atau atom-atom silikon pada permukaan grafena (C_{24}) dipelajari dengan paket Hyperchem dengan metode AM1. Program ini dijalankan dengan komputer Intel Pentium IV Processor 2.66 GHz yang memorinya 256 MB RAM. Hasil perhitungan memperlihatkan setiap atom Si yang mendatangi 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 silikon yang dilepas, yaitu berupa : Si, Si_2 , Si_4 . Energi ikatan sistem dari kompleks ini berkisar antara (-3330,0871)-(-4966,1832) kkal/mol. Untuk energi ikatan (Si_{ad})/n berkisar antara -11,3694-151,4067 kkal/mol. Adsorpsi silikon pada permukaan grafena menurunkan energi celah permukaan tersebut dari 7,0788 eV menjadi 6,5292-4,2761 eV, pada permukaan grafena dengan penjuhan sisi aktif dengan atom Si sebesar 50 % ($C_{24}Si_6$) juga terjadi penurunan energi celah permukaan dari 6,3321 eV menjadi 6,1647-4,4685 eV dan pada permukaan grafena dengan penjuhan sisi aktif dengan atom Si sebesar 100 % ($C_{24}Si_{12}$) juga menurunkan energi celah permukaan tersebut dari 4,8828 menjadi 4,8613-3,9135 eV.

I. PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Kemajuan zaman harus diikuti dengan peningkatan kemampuan dalam hal penguasaan teknologi dalam rangka memudahkan kerja manusia. Salah satu penguasaan teknologi yang berkembang saat ini adalah penggabungan ilmu kimia, khususnya kimia kuantum, dengan ilmu komputer atau lebih dikenal dengan kimia komputasi.

Salah satu bidang teknologi tinggi yang sangat mempengaruhi peradaban manusia di abad ini adalah teknologi semikonduktor dan mikroelektronika. Pembahasan tentang semikonduktor tentunya tidak bisa lepas dari material semikonduktor itu sendiri sebagai bahan dasar pembuatan semikonduktor tersebut. Silikon (Si) dengan persediaan yang berlimpah di bumi, telah menjadi pilihan dalam teknologi semikonduktor. Silikon (Latin : *silicium*) adalah unsur kimia dalam sistem periodik yang memiliki simbol Si dengan nomor atom 14. Unsur kimia ini ditemukan oleh Jons Jakob Berzelius. Dalam sistem periodik Si ditempatkan pada golongan IV A. Silikon dalam bentuk murninya adalah metaloid tetravalen yang kurang reaktif dibandingkan dengan atom C. Silikon merupakan unsur kedua paling berlimpah di dalam kerak bumi, mencapai hampir 25,7 % mengikuti berat^{1,2}.

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 kimia dan kemampuan masing-masing spesies untuk membentuk ikatan dengan C (grafit). Untuk mengetahui daya adsorpsi grafit terhadap atom silikon, maka perlu diketahui energi 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 energi ikatan dan panjang ikatan digunakan suatu metode komputasi menggunakan paket Hyperchem³.

Pada penelitian ini digunakan grafena sebagai pengadsorpsinya. Grafena adalah nama yang diberikan untuk suatu kumpulan atom karbon yang membentuk satu lapisan planar yang rapat sehingga dikategorikan ke dalam struktur dua dimensi (2D) seperti kisi – kisi sarang lebah, dan dijadikan suatu bentuk dasar yang membangun material grafit untuk berbagai dimensi⁴.

Dengan melihat dari penelitian–penelitian sebelumnya, pada paket Hyperchem ada salah satu metode komputasi yang cukup sering digunakan yaitu AM1. AM1 atau singkatan dari Austin Model 1, adalah metode semi empiris untuk perhitungan quantum dari struktur elektronik molekular dalam kimia komputasi⁵.

Colussi, *et.al* menggunakan program *ab initio* telah mempelajari adsorpsi Si pada tiga posisi : pusat hexagonal (hollow), on top, dan posisi jembatan dua pada atom C⁶ maka dalam penelitian ini penulis tertarik untuk melakukan penelitian yang berjudul : **Adsorpsi Atom Silikon pada Permukaan Grafena dengan Metode AM1.**

1.2. Perumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas, maka yang menjadi masalah dalam penelitian yang akan dilakukan ini adalah :

1. Bagaimana interaksi atom silikon pada permukaan Grafena yang dilihat dengan paket hyperchem menggunakan AM1
2. Apakah BE (Binding Energi) dan sifat daya hantar listrik (ΔE) permukaan grafena yang telah menyerap atom–atom Si dipengaruhi oleh posisi atom–atom tersebut pada permukaan

V. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

Dari hasil analisa data yang telah diuraikan pada pembahasan dapat dibuat suatu kesimpulan antara lain :

1. Hasil yang optimal memperlihatkan setiap atom Si yang mendatangi lapisan grafena diserap oleh atom Karbon membentuk kompleks permukaan Si dengan posisi C-Si jembatan tilted dan jembatan lyingdown terhadap lapisan
2. Semua sistem yang didapatkan bersifat isolator ΔE berkisar 3,9135–6,5292 eV
3. Adsorpsi silikon pada permukaan grafena tanpa penjenjuran (C_{24}) menurunkan energi celah permukaan tersebut dari 7,0788 eV menjadi 6,5292–4,2761 eV, pada permukaan dengan penjenjuran sisi aktif sebesar 50 % ($C_{24}Si_6$) juga terjadi penurunan energi celah permukaan dari 6,3321 eV menjadi 6,1647–4,4685 eV dan pada permukaan dengan penjenjuran sisi aktif sebesar 100 % ($C_{24}Si_{12}$) juga menurunkan energi celah permukaan tersebut dari 4,8828 menjadi 4,8613–3,9135 eV
4. BE (Si_{ad})/n berkisar antara -11,3694–151,4067 kkal/mol, BE sistem dari kompleks ini berkisar antara (-3330,0871)–(-4966,1832) kkal/mol
5. Atom – atom silikon berdifusi dari :
 - C kelompok 1 ke C kelompok 1 lainnya
 - C kelompok 1 ke C kelompok 2
 - C kelompok 1 ke C kelompok 3
 - C kelompok 2 ke C kelompok 3
 - C kelompok 3 ke C kelompok 3 lainnya
6. Ada atom silikon yang diserap oleh permukaan dan ada pula atom silikon yang dilepas, yaitu berupa : Si, Si_2 , Si_4
7. Permukaan $C_{24}Si_{12}$ (bentuk mangkuk) diduga dapat menyimpan silikon, setelah optimasi tidak satupun dapat menyimpan silikon

DAFTAR PUSTAKA

1. W. W. Wenas. *Teknologi Semikonduktor Sekarang dan yang Akan Datang*. Artikel-artikel populer LIPI, Fisika LIPI. 2004.
2. http://www.chem-is-try.org/tabel_periodik.
3. 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
4. A. K. Geim and K. S. Novoselov. *The Rise of Graphene*. Nature Materials. Vol 6. 2007. Hal. 183 – 190
5. M. J. S. Dewar, et. al. *AM1 : A New General Purpose Quantum Mechanical Molecular Model*. J. Am. Chem Soc. American Chemical Society. 1984. Hal : 3902-3909
6. M. L. Colussi, et. al. *Silicon Adsorption In Single Walled Nanotubes*. Brazilian Journal of Physics, vol. 36, No. 3B. 2006. Hal 886 – 889
7. <http://id.wikipedia.org/wiki/Graphite>.
8. <http://mineral.galleries.com/elements/Graphite>.
9. Stecner and Martha. W. 1968. *The Merck Index*, 8th ed. Published by : Merck and Co. Inc. Rahway, N.J, USA. Hal : 4810
10. D. Martaningtyas. "Bola Karbon Nan Unik", *Pikiran Rakyat Bandung*. Departemen Kimia ITB ; Bandung. 2006.
11. <http://id.wikipedia.org/wiki/Silikon>.
12. Bowser. *Inorganic Chemistry*. Cole Publishing Company, Pasific Grove, Co. Inc. Rahway, N, J, USA. 1968. Hal : 4810
13. <http://id.wikipedia.org/wiki/Karbon>.
14. N. Allinger. Hyperchem Release 5.0 For Windows Reference Manual. Hypercube, Inc, Canada. 1996. Hal : 1 – 3, 204 – 211.
15. D. F. Perepickha, et. al. *Silicon Nanotubes*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KgaA, D-69451 Weinheim, small 2006, 2, No. 1. 2006. Hal : 22 – 25