

LAPORAN AKHIR
PENELITIAN UNGGULAN PERGURUAN TINGGI (P)



STUDI STRUKTUR ELEKTRONIK DAN SIFAT OPTIK SILICENE
UNTUK BAHAN SEL SURYA DI MASA DEPAN DENGAN TEORI
KERAPATAN FUNGSIONAL (*DENSITY FUNCTIONAL THEORY*)

Tahun ke 1 dari rencana 2 tahun

Ketua : Mauludi Ariesto Pamungkas, Ph.D
NIDN:0012047302

Anggota 1: Lailatin Nuriyah, S.Si, MSi
NIDN: 0017065603

Anggota 2: Gancang Saroja, S.Si, MT
NIDN:0018117704

Dibiayai oleh:

Direktorat Jenderal Pendidikan Tinggi,
Kementerian Pendidikan dan Kebudayaan, Melalui DIPA Universitas Brawijaya
Nomor : DIPA-023.04.2.414989/2013, Tanggal 5 Desember 2012, dan berdasarkan
SK Rektor Universitas Brawijaya Nomor : 295/SK/2013 tanggal 12 Juni 2013

UNIVERSITAS BRAWIJAYA
November 2013

HALAMAN PENGESAHAN

Judul	: Studi struktur elektronik dan sifat optik silicene untuk bahan sel surya di masa depan dengan Teori Kerapatan Muatan Density Functional Theory)
Peneliti / Pelaksana	
Nama Lengkap	: Mauludi Ariesto Pamungkas, S.Si, M.Si, Ph.D
NIDN	: 0012047302
Jabatan Fungsional	: asisten ahli
Program Studi	: Fisika
Nomor HP	: 081231397790
Alamat surel (e-mail)	: m_ariesto@ub.ac.id, mariesto@gmail.com
Anggota (1)	
Nama Lengkap	: Lailain Nuriyah, S.Si, M.Si
NIDN	: 0017065603
Perguruan Tinggi	: Universitas Brawijaya
Anggota (2)	
Nama Lengkap	: Gancang Saroja, S.Si, MT
NIDN	: 0018117704
Tahun Pelaksanaan	: Tahun ke 1 dari rencana 2 tahun
Biaya Tahun Berjalan	: Rp. 51.000.000
Biaya Keseluruhan	: Rp. 102.000.000

Malang, 19 Desember 2013

Mengetahui,
Dekan FMIPA



(Prof. Dr. Marjono, M.Phil.)
NIP.196211161988031004

Ketua,



(Mauludi Ariesto Pamungkas, Ph.D)
NIP.197304122000031013

Menyetujui,

Pjs.Ketua LPPM UB



(Prof. Dr. Sri Chuznemi, MS)
NIP.19530514 198002 2 001

ABSTRAK

STUDI STRUKTUR ELEKTRONIK DAN SIFAT OPTIK SILICINE UNTUK BAHAN SEL SURYA DI MASA DEPAN DENGAN TEORI KERAPATAN FUNGSIONAL (*DENSITY FUNCTIONAL THEORY*)

Struktur elektronik dan sifat optik silicine diinvestigasi dengan simulasi quantum . Pendekatan yang digunakan adalah pendekatan teori kerapatan muatan (desity functional theory) dan *pseudopotential*. Silicine diketahui memiliki kesamaan dalam hal struktur dan sifat semimetal dengan graphene namun berbeda dalam hal ikatan atom-atomnya. Sifat-sifat optik silicine diprediksi akanmemiliki banyak perbedaan dengan sifat silikon 3 dimensi. Pengetahuan sifat-sifat optic ini akansangat bermanfaat untuk aplikasi material ini di masa depan khususnya sebagai material alternatif sel surya. Telah dilakukan validasi terhadap parameter-parameter simulasi yang menunjukkan bahwa parameter-parameter simulasi yang digunakan bisa memperlihatkan hasil yang serupa dengan yang dilakukan secara eksperimental maupun perhitungan dengan metode lain.

ABSTRACT

STUDY OF ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF SILICENE AS A POTENTIAL MATERIAL FOR SOLAR CELL USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Electronic structure and optical properties of silicene is investigated using quantum simulation. Density Functional Theory and pseudopotential are used in this simulation. Silicene is well known that it has similar structure and semimetal behavior to that of graphene. However they differ in their atomic bondings. Optical properties of silicene are predicted to be different from that of 3D silicon. Knowledge of electronic and optical properties of silicene are very beneficial in application of this material as alternative material for solar cell. Validation of parameters used in simulation has shown that the parameters can produce result which is similar to that produced by previous experimental works and simulations.

RINGKASAN

Struktur elektronik dan sifat optik silicone diinvestigasi menggunakan metode density functional theory. Untuk memvalidasi kualitas pseupotensial yang digunakan dalam simulasi ini, struktur dasar silicon dibandingkan dengan yang dihasilkan penelitian-penelitian sebelumnya. Hasil validasi menunjukkan bahwa struktur dasar tersebut konsisten dengan struktur dasar yang dihasilkan eksperimen. Pada penelitian ini, dua ukuran silicone 7x7 dan 8x8 unit cell digunakan untuk melihat pengaruh ukuran. Silicene di-hydrogenisasi untuk menghilangkan efek reaksi dari electron yang tidak berikatan pada ujung silicene. Geometri silicone di optimasi untuk mencapai struktur yang stabil.

SUMMARY

Electronic structure and optical properties of silicene is being investigated using density functional theory. In order to validate reliability of pseudopotential used in this simulation, groundstate structure of silicon is compared to that resulted from previous works. The result shows the ground state structure is in a good agreement with that produced by experimental works. In present work, two size of silicone 7x7 and 8x8 unit cell are used to see the influence of the size. Silicene is hydrogenised to prevent unexpected reaction due to dangling bonds. Geometry of Silicene is optimized to find stable structure.

DAFTAR PUSTAKA

1. De Padova P, Perfetti P, Olivieri B, Quaresima C, Ottaviani C, Le Lay G., 1D graphene-like silicon systems: silicene nano-ribbons, *J Phys Condens Matter*. 223001, 24, (2012)
2. Phaedon Avouris, Graphene: Electronic and Photonic Properties and Devices, *Nano Lett*. 2010, 10, 4285–4294
3. R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, A. K. Geim, Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene, *Science* , 1308,320, (2008)