

A MINI REVIEW: STUDI KOMPUTASI TERHADAP STRUKTUR ELEKTROLIT PADA SILICENE, GRAPHENE, DAN GERMANENE

A MINI REVIEW: COMPUTATIONAL STUDY OF ELECTROLYTE STRUCTURES OF SILICENE, GRAPHENE, AND GERMANENE

Harvina, Rahmat Gunawan*, Veliyana Londong Allo

Laboratorium Kimia Fisik, Jurusan Kimia, FMIPA, Universitas Mulawarman, Samarinda, Indonesia

*E-mail: gunawan@fmipa.unmul.ac.id

Diterbitkan: 31 Oktober 2024

ABSTRACT

Research on two-dimensional (2D) materials such as graphene, silicene, and germanene has garnered significant attention due to their unique electronic and mechanical properties. This mini review employs Density Functional Theory (DFT) to compare the electronic properties of these three materials. The results show that graphene, with sp^2 hybridization, possesses outstanding electrical conductivity and high mechanical strength, with a lattice constant of 2.46 Å. Silicene and germanene, composed of silicon and germanium atoms respectively, exhibit higher surface reactivity and potential for advanced electronic applications due to their ability to open band gaps through various methods. Silicene has a lattice constant of 3.90 Å and an electronegativity of 1.9, while germanene has a lattice constant of 3.97 Å and an electronegativity of 2.01. The band structures of silicene and graphene do not exhibit band gaps, with dominant states in the p orbital, whereas germanene displays semiconductor behavior with a zero band gap opening at the K-point. Graphene shows high in-plane stiffness, while silicene and germanene have respective stiffness, with graphene and silicene being brittle and germanene being ductile. This study provides insights into the fundamental differences in the electronic properties of graphene, silicene, and germanene, as well as their potential applications in semiconductor technology and high-speed, low-energy electronic devices.

Keywords: Silicene, Graphene, Germanene, DFT, Electronic structure

PENDAHULUAN

Penelitian tentang material dua dimensi (2D) seperti silicene, graphene, dan germanene telah menjadi fokus utama dalam beberapa dekade terakhir karena sifat elektronik dan mekaniknya yang unik. Ketiga material ini terdiri dari satu lapisan atom silikon, karbon, dan germanium, yang tersusun dalam kisi heksagonal. Meskipun memiliki struktur dasar yang mirip, perbedaan elemen penyusunnya menghasilkan sifat fisik dan kimia yang berbeda [1]. Graphene memiliki struktur heksagonal dengan atom karbon dalam hibridisasi sp^2 , memberikan sifat elektronik, optik, dan mekanik yang menarik [2]. Teknologi semikonduktor mengatasi kekurangan graphene, menciptakan material baru dengan struktur dan sifat serupa, termasuk silikon dan germanium sebagai semikonduktor golongan IV [3].

Silicene dan germanene memiliki struktur yang sama dengan graphene, tetapi keduanya memiliki reaktivitas permukaan yang berbeda dibandingkan dengan graphene. Silicene memiliki reaktivitas permukaan yang jauh lebih tinggi daripada graphene, yang merupakan lapisan tunggal grafit. Akibatnya, bahkan penyerapan atom yang sesuai di satu sisi silicene atau kontak dengan bahan berlapis tunggal dapat menghasilkan struktur yang stabil [4]. Di sisi lain, germanene menunjukkan reaktivitas permukaan yang lebih tinggi lagi dibandingkan dengan graphene dan silicene. Silicene, yang terdiri dari atom silikon, menunjukkan potensi dalam aplikasi elektronik karena kemampuannya untuk membuka celah pita melalui berbagai metode. Graphene, yang terdiri dari atom karbon, terkenal karena konduktivitas listriknya yang luar biasa dan kekuatan mekaniknya. Germanene, dengan atom germanium, menunjukkan sifat elektronik yang menjanjikan, termasuk mobilitas pembawa muatan yang tinggi.

Metode teori fungsi kerapatan (DFT) telah menjadi alat yang sangat penting dalam studi

This is an open-access article under the [CC-BY-SA](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/) license.



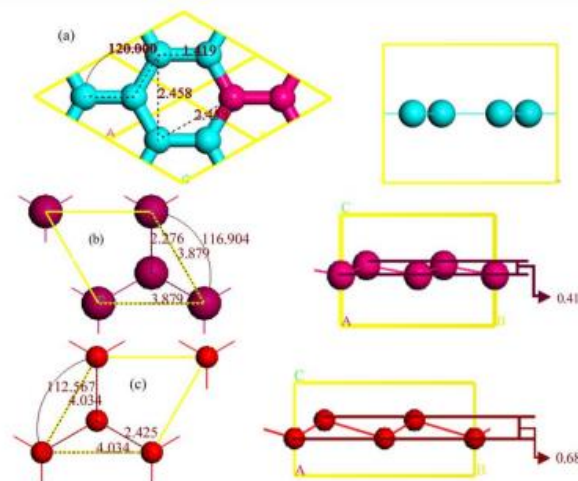
komputasi material ini. DFT memungkinkan analisis mendalam terhadap struktur elektronik dan sifat ikatan dalam material. Studi komputasi menggunakan DFT dapat mengungkap informasi penting tentang stabilitas, struktur pita elektronik, dan interaksi antar atom dalam material 2D ini. Mini Review ini akan mengkaji struktur elektrolit silicene, graphene, dan germanene melalui pendekatan DFT, dengan tujuan memahami perbedaan fundamental dalam sifat elektronik dan potensinya untuk aplikasi praktis.

METODOLOGI PENELITIAN

Metode yang digunakan pada *review* ini yaitu studi literatur dengan melakukan penapisan pada artikel yang membahas mengenai studi elektronik terhadap sifat elektronik dari suatu material seperti Silicene, Graphene, dan Germanene dengan menggunakan metode Teori Fungsional Kerapatan (DFT). Penapisan artikel dilakukan pada situs google scholar, research gate dan semantic scholar yang dipublikasi pada rentang tahun 2014-2023. Kemudian data-data yang diperoleh dilakukan perbandingan dan dijadikan satu kesatuan untuk mendapatkan data yang diharapkan pada *review* ini.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Pada studi elektronik terhadap material graphene, silicene dan germanene diperoleh bahwa struktur ketiganya berbentuk heksagonal.



Gambar 1. Struktur material 2D (a) graphene, (b) silicene, (c) germanene [5]

Graphene, silicene, dan germanene memiliki struktur heksagonal seperti sarang lebah yang terdiri dari dua atom dalam pita π dan π^* , berasal dari orbital p_z [6]. Graphene memiliki hibridisasi sp^2 dengan ikatan σ yang kuat, menghasilkan modulus Young sebesar 1 TPa dan kekuatan pita 130 GPa. Orbital p yang tidak terhibridisasi membentuk pita π setengah terisi, menjadikan graphene semimetal dengan fermion Dirac tanpa massa. Graphene menunjukkan mobilitas pembawa tinggi, konduktivitas termal $3000-5000 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, dan transparansi tinggi. Silicene memiliki hibridisasi campuran sp^2-sp^3 yang mengakibatkan struktur heksagonal pada silicene menekuk. Silicene memiliki hibridisasi sp^2-sp^3 campuran yang menghasilkan struktur heksagonal menekuk dengan celah spin-orbit 1,55 eV, lebih besar dari graphene. Ini memberikan silicene sifat fisik unik seperti efek quantum spin Hall (QSH), resistensi magnet raksasa, dan efek elektro-optik nonlinier. Germanene memiliki struktur sarang lebah dengan tekukan rendah dan celah spin-orbit 23,9 meV, lebih besar dibandingkan graphene dan silicene, yang membuatnya cocok untuk aplikasi perangkat berkecepatan tinggi dan konsumsi energi rendah dengan mobilitas pembawa tinggi dan menunjukkan QSHE. Germanene juga berhasil disintesis melalui pertumbuhan epitaksi pada berbagai substrat [7].

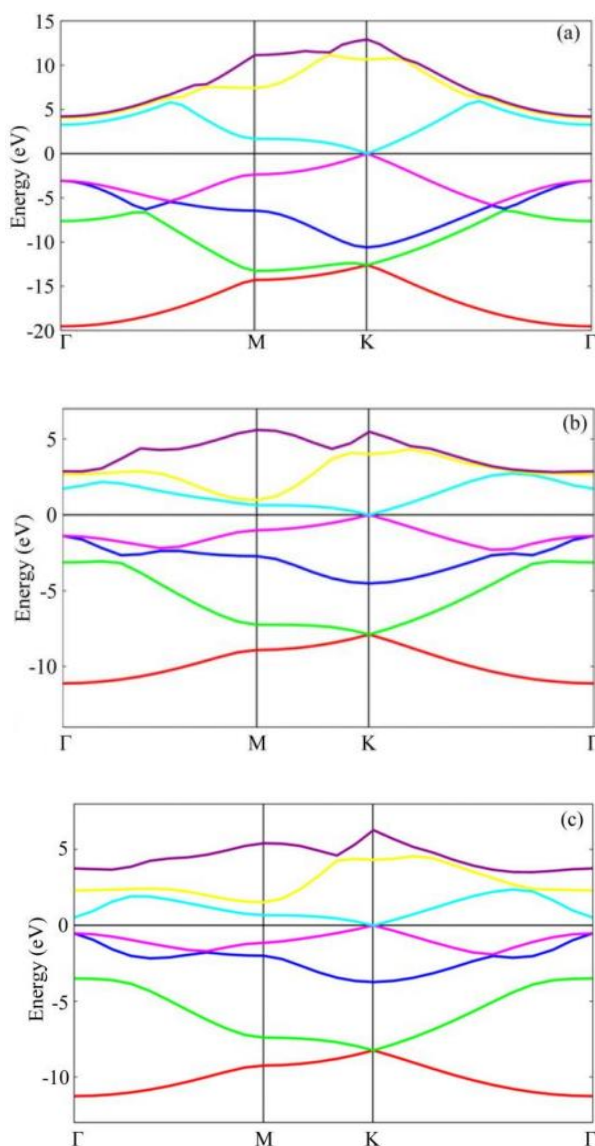
Pada perhitungan *lattice constant* graphene didapatkan nilai *lattice constant* graphene yang paling stabil adalah sebesar $2,46 \text{ \AA}$ nilai ini. Sedangkan pada silicene didapatkan *lattice constant* yang paling stabil sebesar $3,90 \text{ \AA}$ dan pada germanene diperoleh *lattice constant* yang paling stabil sebesar $3,97 \text{ \AA}$ [3]

Tabel 1. Nilai konvergensi lattice constant

Jenis Material	Hasil Perhitungan
Graphene	2,46 [3]
Silicene	3,90 [3]
Germanene	3,97 [3]

Hasil perhitungan menunjukkan bahwa nilai *lattice constant* germanene lebih besar dibandingkan dengan silicene dan graphene, hal ini dikarenakan atom silikon yang berada pada struktur germanene dan silicene memiliki jari jari atom yang lebih besar dibandingkan dengan karbon pada struktur graphene [3].

Struktur pita elektronik dihitung pada simetri tinggi $\tilde{\gamma}$, M, K, $\tilde{\gamma}$ di zona Brillouin pertama. Pada graphene, struktur pita elektronik menunjukkan hibridisasi sp^2 dan keberadaan orbital pz yang tegak lurus, menghasilkan kerucut Dirac pada energi Fermi di mana elektron bertindak seperti fermion tak bermassa. Silicene dan germanene menunjukkan hibridisasi yang berubah dari sp^2 ke sp^3 , menyebabkan terbentuknya orbital campuran sp^2/sp^3 . Tekukan ini mengurangi tumpang tindih orbital pz dan meningkatkan tumpang tindih dengan orbital planar $\tilde{\gamma}$, mengurangi pergerakan bebas elektron seperti pada graphene. Linearitas pada graphene berubah menjadi kuadrat dengan celah kecil sepanjang arah K pada tingkat Fermi [5].



Gambar 2. Struktur pita elektronik (a) graphene (b) silicene (c) germanene [5].

Pada gambar ke-3, dijelaskan bahwa pita yang terbentuk dari orbital 2s, 2px, dan 2py pada pita valensi sangat terlokalisasi dan tidak mempengaruhi sifat elektronik. Konduktivitas terutama berasal dari elektron pada orbital pz. Titik Dirac pada kurva dispersi energi menunjukkan bahwa elektron berperilaku sebagai fermion tak bermassa dengan celah pita nol dalam graphene. Pada material 2D lainnya, mobilitas elektron berkurang dan massa efektif meningkat. Karena adanya celah kecil, dispersi energi pada titik K berubah dari linier menjadi kuadrat [5].

Tabel 2. Populasi atom dan keelektronegatifan

Jenis Material	Populasi Atom (Muliken)		Entalpi Formasi (eV)	Keelektronegatifan
	S	P		
Graphene	1,05	2,95	3.10E+02	2,55
Silicene	1,4	2,6	3.14E+02	1,9
Germanene	1,57	2,43	3.14E+02	2,01

Energi orbital s hibridisasi sepanjang arah \tilde{y} sangat rendah pada graphene sekitar 20 eV. Energinya meningkat menjadi $\tilde{y}11$ eV pada silicene dan germanene. Energi pz orbital pada graphene sebesar $\tilde{y}8$ eV sedangkan pada silicene dan germanene terletak antara $\tilde{y}3$ eV dan $\tilde{y}4$ eV. e. Kesenjangan energi menunjukkan tren menurun sepanjang arah \tilde{y} : 7 eV pada graphene, 3 eV di silicene dan 1 eV di germanene. Hal ini membuktikan bahwa energi orbital berkurang seiring dengan bertambahnya jari-jari ionik. Nilai-nilai ini sangat sesuai dengan hasil yang dilaporkan [5].

KESIMPULAN

Studi komputasi terhadap struktur elektronik graphene, silicene, dan germanene menunjukkan perbedaan signifikan dalam sifat fisik dan elektronik. **Graphene** memiliki struktur heksagonal dengan hibridisasi sp^2 , modulus Young 1 TPa, dan kekuatan pita 130 GPa. Orbital pz membentuk pita π setengah terisi, menghasilkan fermion Dirac tanpa massa dan konduktivitas termal tinggi ($3000-5000 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$). Linearitas dispersi energi berubah menjadi kuadrat pada titik K. **Silicene** memiliki hibridisasi campuran sp^2-sp^3 yang menyebabkan struktur menekuk dengan celah spin-orbit 1,55 eV. Sifat uniknya termasuk efek quantum spin Hall (QSH), resistensi magnet raksasa, dan efek elektro-optik nonlinier. Lattice constant stabilnya adalah 3,90 Å. **Germanene** memiliki struktur heksagonal dengan tekukan rendah dan celah spin-orbit 23,9 meV. Struktur ini cocok untuk aplikasi berkecepatan tinggi dan konsumsi energi rendah, dengan mobilitas pembawa tinggi dan menunjukkan QSHE. Lattice constant stabilnya adalah 3,97 Å. Perbandingan energi orbital menunjukkan tren menurun seiring bertambahnya jari-jari ionik: energi orbital s sepanjang arah \tilde{y} meningkat dari 20 eV pada graphene, menjadi 11 eV pada silicene dan germanene, sementara energi orbital pz menurun dari 8 eV pada graphene menjadi antara 3 eV dan 4 eV pada silicene dan germanene. Kesenjangan energi sepanjang arah \tilde{y} juga menurun: 7 eV pada graphene, 3 eV pada silicene, dan 1 eV pada germanene, yang mencerminkan penurunan energi orbital seiring dengan meningkatnya jari-jari ionik.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada dosen pembimbing I dan pembimbing II atas bimbingannya dalam menulis review ini. Terima kasih juga kepada Teman-teman yang sudah menemani penulis dalam penulisan review.

DAFTAR PUSTAKA

[1] Acun, A., Zhang, L., Bampoulis, P., Farmanbar, M., Houselt, A Van, Rudenko, A. N., Lingenfelder, M., Brocks, G., Poelsema, B., Katsnelson, Ml., & Zandvliet, HJW. (2015). Germanene: analog germanium dari graphene. *Jurnal Fisika: Materi Terkondensasi*, 27(44),1-11.

[2] Rafitasari, Y., Suhendar, H., Imani, N., Luciana, F., Radean, H., & Santoso, I. (2016). Sintesis Graphene Oxide Dan Reduced Graphene Oxide. *Prosiding Seminar Nasional Fisika (E-Journal)*, 5, 95-98.

- [3] Maftuhin, W., & Pamungkas, M. A. (2016). Studi Sifat Elektronik Silicene dengan Pendekatan Teori Kerapatan Fungsional. *Brawijaya Physics Student Journal*.
- [4] Galashev, A. Y. & Vorob'ev, A. S. (2023). Ab Initio Study of the Electronic Properties of a Silicene Anode Subjected to Transmutation Doping. *International Journal Of Molecular Sciences*, 24, 1-18.
- [5] John, R., & Merlin, B. (2016). Theoretical Investigation of Structural, Electronic, and Mechanical Properties of Two Dimensional C, Si, Ge, Sn. *Crystal Structure Theory and Applications*, 5, 43-45.
- [6] Nigar, S., Zhou, Z., Wang, H., & Imtiaz, M. (2017). Modulating The Electronic And Magnetic Properties Of Graphene. *Royal Society Of Chemistry View Journal*, 7, 51546-51580.
- [7] Chen, J., Wang, C., Li, H., Xu, X., Yang, J. Huo, Z., Wang, L., Zhang, W., Xio, X., & Ma, Y. (2023). Recent Advances in Surface Modifications of Elemental Two-Dimensional Materials: Structures, Properties, and Applications. *Molecules*, 28 (200), 1-23.