



KAJIAN TEORETIK UNTUK MENENTUKAN INDEKS BIAS DARI  
SEMIKONDUKTOR COPPER-PHTHALOCYANINE  
BERDASARKAN CELAH ENERGINYA

Alkhafi Maas Siregar dan Novi Febrina S

Jurusan Fisika Universitas Negeri Medan

Email : [alkhafi@unimed.ac.id](mailto:alkhafi@unimed.ac.id)

Diterima September 2017; Disetujui Oktober 2017; Dipublikasikan November 2017

ABSTRAK

Penelitian ini dilakukan untuk menentukan indeks bias semikonduktor *Cu-Phthalocyanine* berdasarkan celah energinya. Penentuan indeks bias menggunakan metode semi empiris ZINDO/I dan perhitungan menggunakan pemrograman matlab. Pemodelan struktur diperoleh dengan memberikan masukan, yaitu unsur, senyawa, dan jumlah atom. Optimasi dilakukan menggunakan energi HOMO dan LUMO untuk memperoleh celah energi. Dengan menggunakan Persamaan Moss, Ravindra et al, Herve-Vandamme, Reddy, dan Kumar- Singh, nilai celah energi dapat menentukan nilai indeks bias. Pada energi 3,854757 eV untuk HOMO dan 3,538368 eV untuk LUMO, diperoleh celah energi 0,3164eV. Untuk menentukan nilai indeks bias, celah energi digunakan pada persamaan yang sesuai dengan ketentuan. Berdasarkan ketentuan dari setiap persamaan, nilai indeks bias yang sesuai pada celah energi 0,3164 eV adalah indeks bias dari persamaan Moss, dengan nilai indeks bias yaitu 4,1627.

**Kata kunci** : semikonduktor, phthalocyanine, celah energi, indeks bias

PENDAHULUAN

Pada saat ini, perkembangan elektronika mengalami kemajuan yang sangat pesat dalam dunia modern. Kemajuannya terjadi setelah ditemukannya komponen semikonduktor (zat padat) yang memberikan banyak sifat-sifat listrik yang dapat memecahkan persoalan elektronika (Rio dan Lida, 1980). Semikonduktor terdiri dari ikatan kovalen dari elektron bebas. Berdasarkan elektron bebasnya, suatu atom yang dikatakan semikonduktor harus memiliki elektron bebas sebanyak empat elektron valensi (Malvino, 1985). Elektron bebas tidak dapat bergerak

secara bebas. Oleh karena itu elektron bebas harus menerima energi dari luar agar dapat membatasi pergerakan dalam atom. Cara agar elektron bebas dapat bebas adalah dengan memberi elektron suatu celah energi (Rio dan Lida, 1980).

Berdasarkan jenis bahannya, semikonduktor terdiri dari dua bagian yaitu semikonduktor anorganik dan semikonduktor organik. Semikonduktor anorganik adalah semikonduktor yang terbuat dari logam. Semikonduktor organik adalah semikonduktor yang harus digabung dengan logam yang memiliki energi ionisasi kecil akan mudah melepaskan elektron pada saat

disatukan dengan bahan organik, semakin mudah melepaskan elektron, maka sifat konduktivitasnya akan bertambah (Hikmah, 2014).

Salah satu bahan organik yang digunakan dalam pembuatan semikonduktor organik adalah *phthalocyanine*. *Phthalocyanine* adalah bahan yang memiliki kemampuan untuk menyerap foton dari sinar matahari pada panjang gelombang sinar yang tampak. Untuk memaksimalkan penyerapan foton, maka *phthalocyanine* harus di konjugasi dengan logam. Logam yang dipilih adalah logam yang memiliki energi ionisasi lebih kecil sehingga mudah melepaskan elektron pada saat disatukan dengan bahan organik. Tembaga (Cu) adalah salah satu logam yang mudah melepaskan elektron.

Suatu bahan dapat disebut bahan semikonduktor apabila celah energinya  $E_g < 6\text{eV}$  (Oktaviani dan Astuti, 2014). Pada semikonduktor, kulit yang terisi elektron disebut *Highest Occupied Molecular Orbital* (HOMO) dan kulit yang tidak terisi disebut *Lowest Unoccupied Molecular Orbital* (LUMO). Selisih dari kedua energi tersebut dinamakan celah energi. Celah energi mencerminkan perbedaan tingkatan energi antara Energi HOMO dan Energi LUMO, yang dinyatakan dengan :

$$E_g = E_{LUMO} - E_{HOMO} \quad (1)$$

$E_{HOMO}$  : Energi pada kulit yang terisi elektron

$E_{LUMO}$  : Energi pada kulit yang tidak terisi elektron

$E_g$  : Celah energi (Sholihun, 2009).

Indeks bias dan celah energi adalah dua kuantitas penting yang menentukan perilaku optik dan elektronik semikonduktor. Indeks bias dapat menurun dengan celah energi. Indeks bias material diketahui menurun dengan celah energi karena dua kuantitas material diyakini memiliki korelasi tertentu.

Moss membuat upaya pertama yang saling berhubungan untuk indeks bias dan celah energi dalam semikonduktor dan memberikan hubungan yang umum sebagai,

$$n^4 E_g = 95\text{eV} \quad (2)$$

dimana  $n$  adalah indeks bias optik dan  $E_g$  adalah celah energi. Hubungan ini akan mendapatkan nilai indeks bias dengan nilai celah energi yaitu  $0,17\text{eV} < E_g < 3,68\text{eV}$ . Sebuah artikel meneliti tentang pernyataan hubungan ini, sehingga Ravindra et al mengusulkan hubungan linear yang mengatur indeks bias dengan celah energi antara ikatan satu dengan yang lain sebagai,

$$n = 4,084 - 0,62E_g \quad (3)$$

Hubungan ini menjadi satu linier pada celah energi yaitu  $1,5\text{eV} < E_g < 3,5\text{eV}$  dan dapat menyimpang pada nilai celah energi yang lebih tinggi. Berdasarkan teori getaran, Herve dan Vandamme mengusulkan hubungan untuk indeks bias sebagai,

$$n^2 = 1 + (A / (E_g + B))^2 \quad (4)$$

dimana  $A$  adalah energi ionisasi hidrogen =  $13,6\text{eV}$  dan  $B = 3,4\text{eV}$  adalah konstan. Pada semikonduktor golongan II-VI, hubungan ini dapat memperoleh nilai indeks bias dengan nilai celah energi yaitu  $2\text{eV} < E_g < 4\text{eV}$ . Hubungan ini gagal untuk memprediksi nilai indeks bias pada nilai celah energi yang rendah, yaitu  $E_g < 1,4\text{eV}$ .

Reddy mengusulkan hubungan indeks bias sebagai,

$$n^4 (E_g - 0,365) = 154 \quad (5)$$

yang dimana hubungan ini merupakan modifikasi dari hubungan Moss. Hubungan ini memberikan nilai eksperimental untuk celah energi yaitu  $1,1\text{eV} < E_g < 6,2\text{eV}$ . Hubungan ini tidak dapat digunakan (tidak valid) untuk celah energi  $E_g < 0,365\text{eV}$ .

Kumar dan Sing juga memberikan hubungan indeks bias sebagai,

$$n = K E_g^C \quad (6)$$

dimana  $K = 3.3668$  dan  $C = -0.32234$ .

Dengan hubungan ini, indeks bias dapat diperoleh dengan celah energi yaitu  $2\text{eV} < E_g < 4\text{eV}$  (Bahadur dan Mishra, 2013).

Penentuan indeks bias untuk semikonduktor telah diteliti oleh Tripathy (2015) dengan metode eksperimen. Tripathy melakukan pengukuran indeks bias pada senyawa halida alkali untuk semikonduktor menggunakan relasi empiris berdasarkan celah energi yang kemudian diterapkan ke biner serta semikonduktor terner untuk

**Alkhafi Maas Siregar dan Novi Febrina S**, Kajian Teoretik Untuk Menentukan Indeks Bias Dari Semikonduktor Copper-Phthalocyanine Berdasarkan Celah Energinya

berbagai celah energi. Relasi Ravindra mendapatkan nilai indeks bias 4,1 untuk semikonduktor memiliki celah energi lebih besar dari 6,587 eV; Relasi Herve-Vandamme pada nilai celah energi yang rendah ( $E_g < 1,4$  eV) gagal untuk memprediksi nilai indeks bias secara eksperiment, untuk  $E_g > 1,4$ eV Herve mendapat nilai indeks bias yaitu 3,9; Relasi Moss dapat memprediksi nilai indeks bias yaitu  $0,17\text{eV} < E_g < 3,68\text{eV}$  dari celah energi, dan mendapatkan nilai indeks bias yaitu 5,6.

Berdasarkan penelitian yang sudah dilakukan tentang penentuan indeks bias berdasarkan celah energi, semikonduktor dengan metode eksperimen telah mendapatkan hasil namun belum sesuai. Oleh karena itu, untuk mendapatkan hasil yang sesuai, penelitian tentang penentuan indeks bias berdasarkan celah energi semikonduktor organik akan dilakukan dengan metode komputasi. Karena berdasarkan penelitian tentang semikonduktor yang lain, menggunakan metode komputasi didalam penelitian suatu semikonduktor akan lebih menarik, lebih mudah, lebih hemat, dan mendapatkan hasil yang lebih sesuai.

## METODE PENELITIAN

Perhitungan dilakukan menggunakan laptop dengan spesifikasi 1.60GHz, dan Random Access Memory (RAM) 2,00 GB dengan sistem operasi Windows 10 pro, Program hyperchem digunakan untuk memodelkan *Cu-phthalocyanine* dan program Matlab untuk membuat interface.

Memodelkan *Cu-Phthalocyanine* dilakukan di hyperchem, untuk melakukan proses perhitungan celah energi, dilakukan proses optimasi geometri terlebih dahulu, kemudian perhitungan  $E_{HOMO}$  dan  $E_{LUMO}$ . Setelah diperoleh  $E_{HOMO}$  dan  $E_{LUMO}$ , maka nilai celah energi dapat diperoleh dengan menghitung selisih dari nilai  $E_{HOMO}$  dan  $E_{LUMO}$ . Selanjutnya membuat interface pada Matlab. Membuat kode yang digunakan untuk menghitung nilai indeks bias, yaitu :

Persamaan Moss :

$$n^4 E_g = 95\text{eV}$$

Persamaan Ravindra et all. :

$$n = 4.084 - 0.62E_g$$

Persamaan Herve-Vandamme :

$$n^2 = 1 + (A / (E_g + B))^2$$

Dimana A adalah energi ionisasi hidrogen 13,6 eV dan B = 3,47 eV adalah konstan

Persamaan Reddy :

$$n^4(E_g - 0.365) = 154$$

Persamaan Kumar dan Singh :

$$n = K E_g^C$$

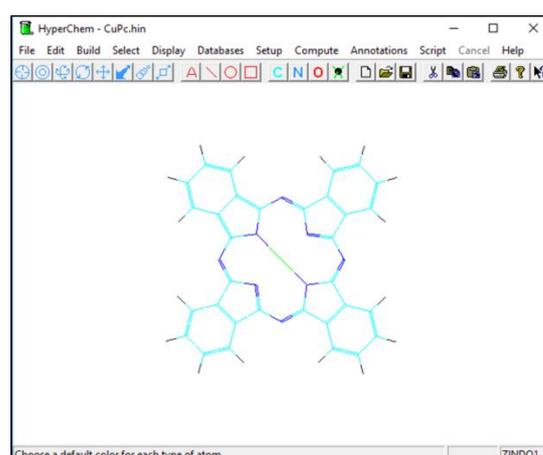
Dimana K = 3.3668 dan C = - 0.32234

Setelah perancangan interface selesai, selanjutnya menghitung nilai celah energi dengan menginput nilai celah energi pada kolom yang tersedia pada interface, lalu menekan tombol hasil pada interface. Sehingga diperoleh nilai indeks bias masing-masing persamaan.

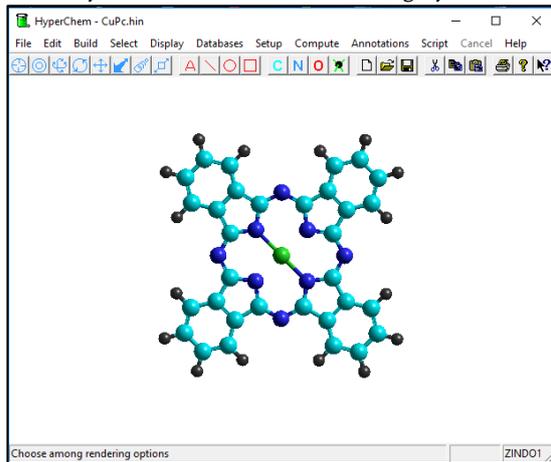
## HASIL DAN PEMBAHASAN

### A. Kajian Optimasi Geometri *Cu-Phthalocyanine*

Pemodelan molekul dilakukan dengan menggunakan *software* hyperchem versi 8.0. Pembuatan struktur dilakukan dengan menginput data penyusun senyawa *Cu-Phthalocyanine* yaitu : 1 atom Tembaga (Cu), 32 atom Karbon (C), 18 atom Hidrogen (H), dan 8 atom Nitrogen (N).



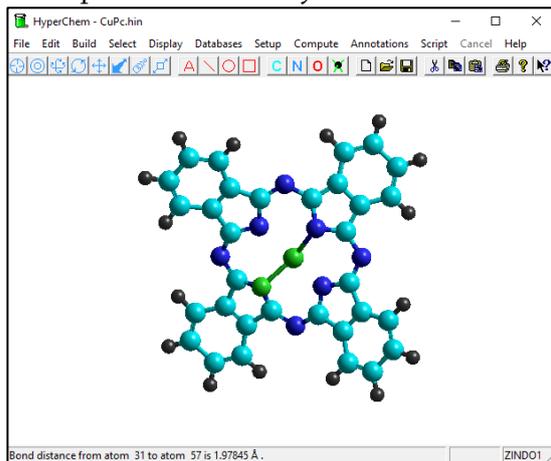
(a)



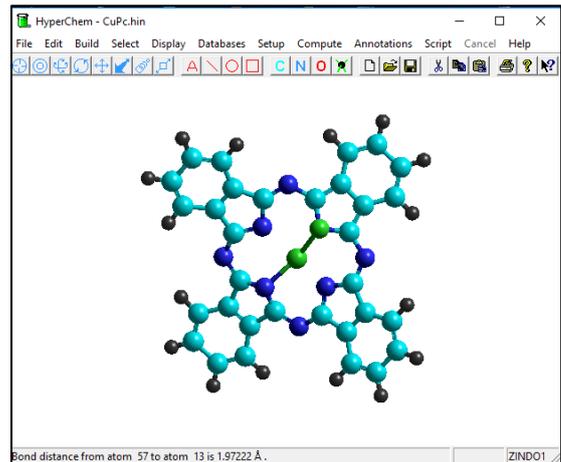
(b)

**Gambar 1.** Bentuk Cu-Phthalocyanine (a) Kompleks 2D; (b) Kompleks 3D.

Phthalocyanine terkonjugasi Tembaga (Cu) termasuk senyawa kompleks. Syarat suatu senyawa dikatakan kompleks apabila memiliki panjang ikatan antara atom pusat dengan atom lainnya hampir bersamaan. Panjang ikatan antar atom dapat ditampilkan dengan cara pilih 2 atom yang akan dihitung panjangnya, klik *Select* lalu pilih *Select Sphere*, maka panjang ikatan atom ditampilkan pada sudut kiri lembar kerja hyperchem, begitu juga dalam menampilkan sudut ikatan atom. Berikut data panjang ikatan pada *Cu-Phthalocyanine* :



(a)



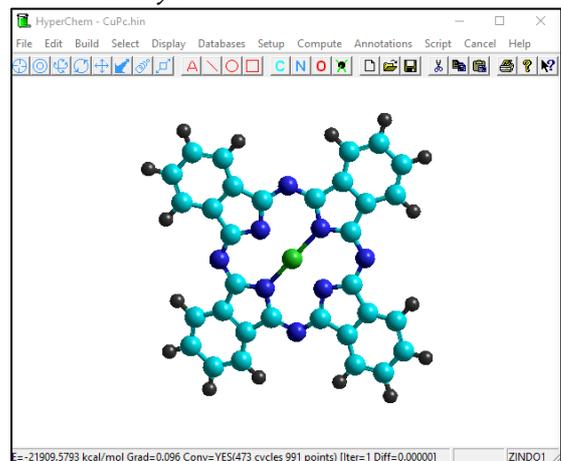
(b)

**Gambar 2.** Panjang ikatan (a) Cu (57) – N (31); (b) Cu (57) – N (13)

**Tabel 1.** Panjang Ikatan *Cu-Phthalocyanine*

Atom yang Terlibat	Panjang Ikatan (Å)
Cu (57) - N (31)	1,97845
Cu (57) - N (13)	1,97222

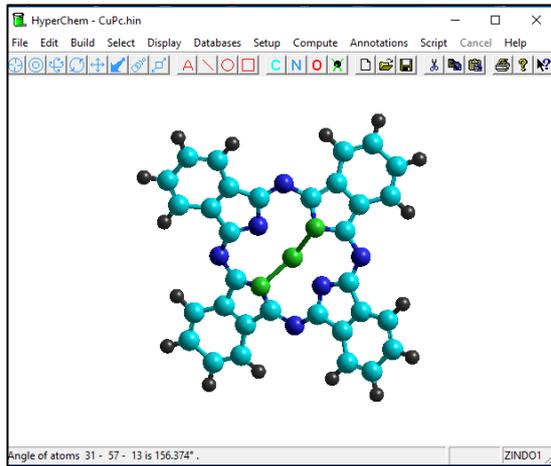
Setelah pembuatan *Cu-Phthalocyanine* dalam tiga dimensi, senyawa *Cu-Phthalocyanine* dioptimasi dengan menggunakan metode ZINDO/1 dengan cara klik *compute* pada menu bar, lalu pilih *optimization geometry*. Hal ini dilakukan untuk mendapatkan struktur yang paling stabil dengan tingkat energi yang lebih minimum. Berikut hasil optimasi geometri *Cu-Phthalocyanine* :



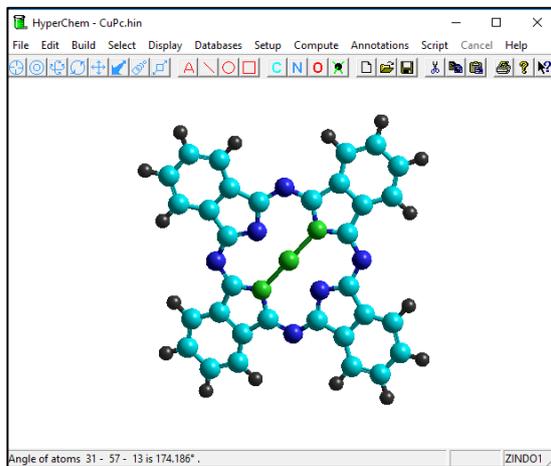
**Gambar 3.** *Cu-Phthalocyanine* teroptimasi

Sudut ikatan berpengaruh dalam distribusi elektron pada suatu molekul dan fleksibilitas

**Alkhafi Maas Siregar dan Novi Febrina S**, Kajian Teoretik Untuk Menentukan Indeks Bias Dari Semikonduktor Copper-Phthalocyanine Berdasarkan Celah Energinya molekul. Sudut ikatan adalah sudut yang terbentuk oleh atom pusat dengan dua atom di sekelilingnya. Semakin besar sudut yang dibentuk maka semakin kurang fleksibel molekul yang terbentuk. Molekul yang memiliki tingkat fleksibilitas yang tinggi memungkinkan untuk dibentuk sangat tipis sebagai bahan semikonduktor.



(a)



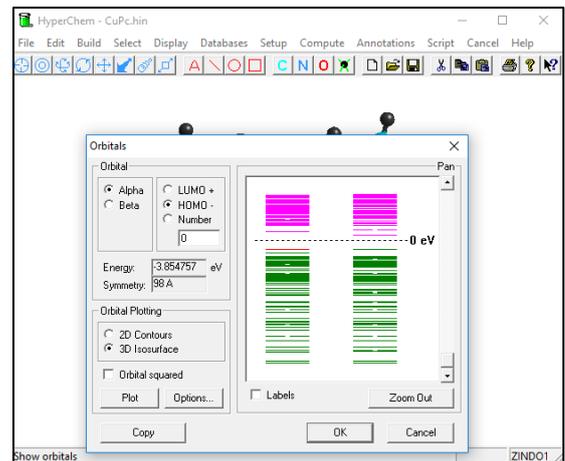
(b)

**Gambar 4.** Sudut Ikatan Cu dan N (a) Sebelum Optimasi; (b) Sesudah Optimasi

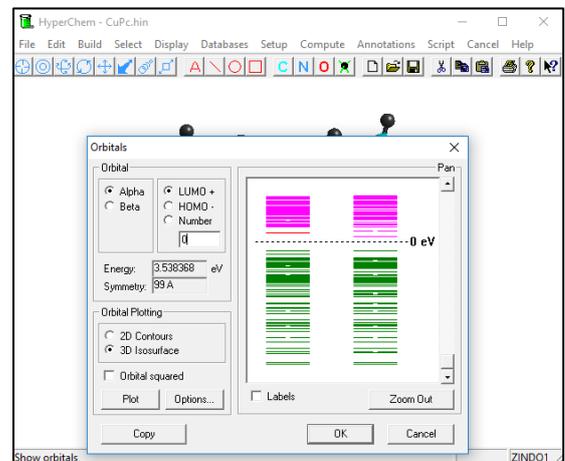
**Tabel 2.** Besar Sudut Ikatan

Atom yang Terlibat	Besar Sudut (°)	
	Sebelum Optimasi	Sesudah Optimasi
N (31) – Cu (57) – N (13)	156,374°	174,186°

Setelah teroptimasi, selanjutnya perhitungan celah energi dapat dilakukan dengan cara klik compute lalu pilih orbital, maka energi LUMO dan energi HOMO akan ditampilkan. Menentukan celah energi *Cu-Phthalocyanine* diperoleh dari selisih energi HOMO dengan energi LUMO. Adapun energi HOMO dan energi LUMO yang dihasilkan adalah sebagai berikut:



(a)



(b)

**Gambar 5.** Tingkatan Energi HOMO-LUMO (a) Energi HOMO; (b) Energi LUMO.

## B. Celah Energi

Menghitung celah energi digunakan metode semi empiris ZINDO/1. Celah energi merupakan perbedaan tingkatan energi antara energi LUMO terhadap energi HOMO, yang dinyatakan dengan :

$$E_{gap} = E_{LUMO} - E_{HOMO}$$

Tabel 3. Nilai Celah Energi

Jumlah Atom				Energi <i>HOMO</i>	Energi <i>LUMO</i>	Celah Energi ( <i>E<sub>g</sub></i> ) <i>E<sub>LUMO</sub></i> - <i>E<sub>HOMO</sub></i>
C	H	N	Cu			
32	18	8	1	3,8547 57eV	3,5383 68eV	0,3164 eV

Dari data tersebut dapat diketahui besar celah energi *Cu-Phthalocyanine*,

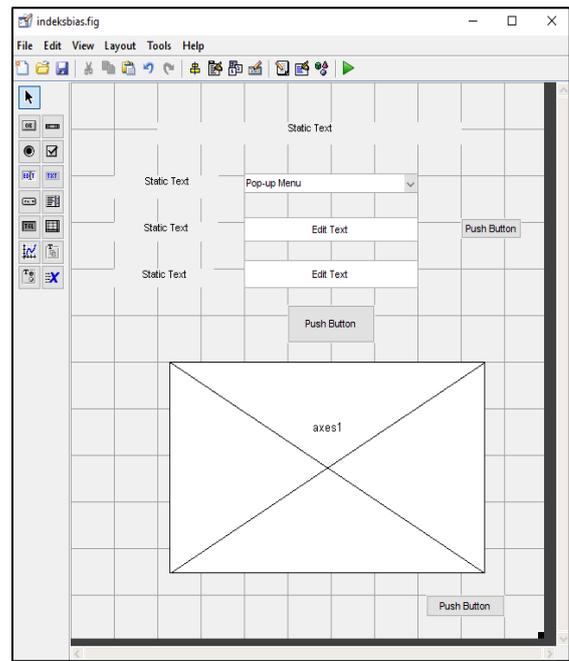
$$E_{gap} = E_{LUMO} - E_{HOMO}$$

$$E_{gap} = |3,538368 - 3,854757|$$

$$E_{gap} = 0,3164eV$$

### C. Interface

Dalam perancangan sebuah figure GUI, dibutuhkan beberapa komponen yang dapat mendukung proses penentuan hasil suatu GUI. Dalam penentuan indeks bias, penulis menggunakan beberapa komponen yaitu 4 static text yang digunakan untuk judul, persamaan, celah energi, dan nilai indeks bias; 2 edit text yang digunakan untuk mengisi nilai celah energi dan menampilkan hasil dari nilai indeks bias; 1 popumenu untuk membuat pilihan tampilan dari setiap persamaan; 3 pushbutton untuk menampilkan tindakan jika diklik untuk hasil, grafik dan keluar; 1 axes untuk menampilkan grafik.



Gambar 6. Rancangan GUI

Setelah membuat rancangan GUI, selanjutnya mengatur layout Komponen.

Tabel 4. Property Inspector

Komponen	Property Inspector			
	Font Size	Font Weight	String	Tag
Static text1	12	Bold	Graphic al User Interfac e (GUI) Matlab Indeks Bias terhadap Celah Energi Cu-Phthalo cyanine	Text1
Static text2	10	Bold	Persama an	Text2
Static text3	10	Bold	Celah Energi	Text3
Static text4	12	Bold	Nilai Indeks Bias	Text5
Edit	10	Normal		Eg

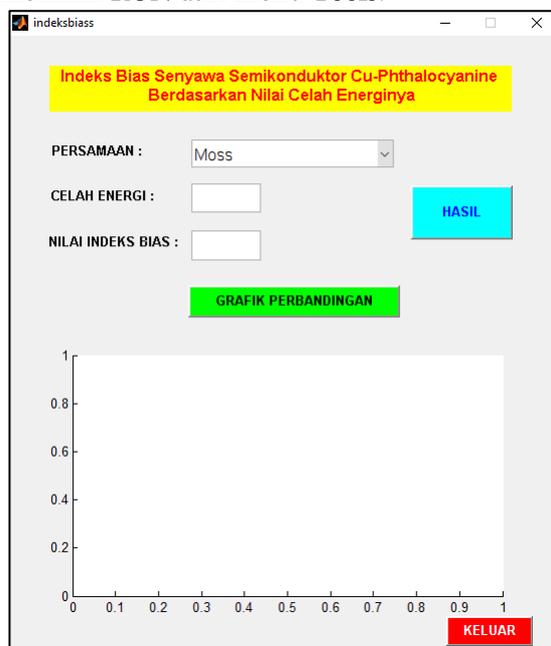
text1				
Edit text2	12	Bold		N
Popup menu	12	Normal	Moss Ravindra et al Herve-Vandamme Reddy Kumar dan Singh	data_popup
Pushbutton1	10	Bold	Hasil	hasil_pushbutton
Pushbutton2	10	Bold	Grafik Perbandingan	grafik_pushbutton
Pushbutton3	10	Bold	Keluar	tkeluar
Axes	10	Normal	-	axes1

#### D. Indeks Bias

Pada penelitian ini untuk menghitung indeks bias berdasarkan celah energi digunakan lima persamaan yang saling berkaitan.

Indeks bias yang diperoleh dari persamaan Moss sesuai, karena celah energi  $E_g$  yang dihasilkan untuk memperoleh nilai indeks bias berada pada kisaran  $0,17\text{eV} < E_g < 3,68\text{eV}$  dan tidak berada pada  $E_g < 0,17\text{eV}$ . Indeks bias yang diperoleh dari persamaan Ravindra tidak sesuai, karena indeks bias tidak akan sesuai jika nilai dari celah energi  $E_g < 6,587\text{eV}$ . Indeks bias yang diperoleh dari persamaan Herve-Vandamme tidak sesuai, karena indeks bias tidak akan sesuai jika nilai dari celah energi  $E_g < 1,4\text{eV}$ . Indeks bias yang diperoleh dari persamaan Reddy tidak sesuai, karena indeks bias tidak akan sesuai jika nilai dari celah energi  $E_g < 0,365\text{eV}$ . Indeks bias yang diperoleh dari persamaan Kumar dan Singh tidak sesuai, karena indeks bias tidak akan sesuai jika nilai dari celah energi tidak berada pada kisaran  $2\text{eV} < E_g < 4\text{eV}$ .

Selanjutnya mengaktifkan GUI dengan memilih RUN dari menu Tools.



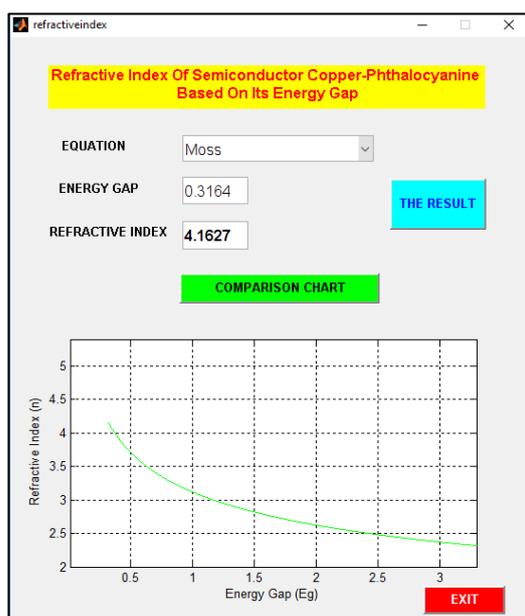
Gambar 7. Tampilan GUI

Tabel 5. Indeks bias yang sesuai

Referensi	Persamaan	Celah Energi	Deskripsi
0,3164 eV	Moss	$0,17 < E_g < 3,68 \text{ eV}$	Valid
	Ravindra et al	$E_g > 6,587 \text{ eV}$	Not Valid
	Herve-Vandamme	$E_g > 1,4 \text{ eV}$	Not Valid
	Reddy	$1,1 < E_g < 6,2 \text{ eV}$	Not Valid
	Kumar-Singh	$2 < E_g < 4 \text{ eV}$	Not Valid

Dari data di atas, dapat disimpulkan bahwa nilai indeks bias yang sesuai berdasarkan nilai celah energi adalah indeks bias dari

**Alkhafi Maas Siregar dan Novi Febrina S**, Kajian Teoretik Untuk Menentukan Indeks Bias Dari Semikonduktor Copper-Phthalocyanine Berdasarkan Celah Energinya persamaan Moss. Sehingga nilai indeks bias yang dihasilkan adalah:



**Gambar 8.** Indeks bias berdasarkan Persamaan Moss

Dari penjelasan diatas, dapat disimpulkan bahwa copper phthalocyanine merupakan suatu semikonduktor organik, yang memiliki rumus kimia yaitu  $C_{32}H_{16}CuN_8$ , dengan nilai celah energi 0,3164eV dan indeks bias yaitu 4,1627.

#### DAFTAR PUSTAKA

- Achmad, Zamroni., (2013), Pengukuran Indeks Bias Zat Cair Melalui Metode Pembiasan Menggunakan Plan Paralel, Pendidikan IPA, Konsentrasi Fisika, Program Pascasarjana Universitas Negeri Semarang, *Jurnal Fisika* Vol. 3 No. 2.
- Bahadur dan Mishra., (2013), *Correlation Between Refractive Index and Electronegativity Difference for ANB8-N Type Binary Semiconductors*, ACTA PHYSICA POLONICA Vol.123, India.
- Hikmah, Aulia dan Utomo, Suryadi Budi., (2014), *Kajian Teoritis untuk Menentukan Celah Energi Kompleks Ag-Phthalocyanine dengan Menggunakan Metode Mekanika Kuantum Semiempiris Zindo/1*, Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia VI.
- Malvino, A. A., (1985), *Aproksimasi Rangkaian Semikonduktor Pengantar Transistor dan Rangkaian Terpadu*, Penerbit Erlangga, Jakarta.
- Oktaviani, Yolanda dan Astuti., (2014), Sintesis Lapisan Tipis Semikonduktor Dengan Bahan Dasar Tembaga (Cu) Menggunakan *Chemical Bath Deposition*, *Jurnal Fisika Unand* Vol. 3, No. 1.
- Pranowo, Harno Dwi., (2009), *Kimia Komputasi*, Universitas Gajah Mada, Yogyakarta.
- Pratiwi, Agustin., (2015), Analisis Perubahan Kadar Logam Tembaga (Cu) pada Penambahan Ion Perak (Ag) dengan Metode Elektrokoagulasi. *Jurnal Kimia Mulawarman* Vol. 13 No. 1.
- Rio, S. Reka dan Iida, Masamori., (1980), *Fisika Dan Teknologi Semikonduktor*, Penerbit P.T. Pradnya Paramita, Jakarta.
- Sahid, (2006), *Panduan Praktis MATLAB*, Penerbit ANDI, Yogyakarta.
- Sholihun, (2009), *Komputasi Parameter Internal Sel Surya Organik dan Penentuan Pola Keterikatannya Terhadap Intesitas Menggunakan Metode LANBV*, Tesis, FMIPA-UGM, Yogyakarta.
- Triphaty, (2015), *Refractive Indices of Semiconductors from Energy gaps*, Department of Physics, Indira Gandhi Institute of Technology, Sarang, Dhenkanal, Odisha-759146, India.
- Zenkevich, E. I., Gaponenko, S. V., Sagun, E.I dan Von, Borczyskowki, (2013), *Bioconjugates Based On Semiconductor Quantum Dots And Porphyrin Ligands: Properties, Excition Relaxation Pathways And Singlet Oxigen Generation Efficiency For PDT Applications*, National Technical University of Belarus, Nezavisimosti Ave.

**Alkhafi Maas Siregar dan Novi Febrina S**, Kajian Teoretik Untuk Menentukan Indeks Bias Dari Semikonduktor Copper-Phthalocyanine Berdasarkan Celah Energinya

Zerner, M., (1991), *Review in Computational Chemistry*, Eds. K.B Lipkowitz and

D. Boyd, VCH 313-320.