



**STUDI PENENTUAN INDEKS BIAS SENYAWA BE-PHTHALOCYANINE
BERDASARKAN CELAH ENERGI MENGGUNAKAN METODE
KOMPUTASI**

Adelita Khairani dan Alkhafi Maas Siregar

Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri
Medan, Indonesia

bubusadelitakhairani@yahoo.co.id

Diterima Desember 2017; Disetujui Januari 2018; Dipublikasikan Februari 2018

ABSTRAK

Tujuan penelitian ini adalah untuk menentukan nilai indeks bias senyawa Be-Phthalocyanine untuk bahan Semikonduktor Organik baru yang ditinjau berdasarkan nilai celah energinya. Senyawa Be-Phthalocyanine dapat digunakan sebagai bahan semikonduktor baru dengan cara menganalisis nilai celah energi dan nilai indeks biasnya. Celah energi diperoleh melalui metode komputasi semiempiris ZINDO/I menggunakan software Hyperchem dengan memberikan masukan unsur dan senyawa terlebih dahulu, lalu mengoptimasi, sehingga diperoleh celah energi. Celah energi dihitung berdasarkan selisih energi pada energi Highest Occupied Molecular Orbital(HOMO) dan energi Lowest Unoccupied Molecular Orbital (LUMO). Energi LUMO yang diperoleh adalah 3,269 eV dan energi HOMO adalah 2,660 eV, sehingga diperoleh celah energi sebesar 0,609 eV. Nilai celah energi yang diperoleh memenuhi kriteria semikonduktor karena memiliki nilai celah energi $0 < E_g < 3$. Penentuan nilai indeks bias senyawa Be-Phthalocyanine dapat diperoleh melalui lima persamaan, yaitu :Persamaan Moss, Persamaan Ravindra et al, Persamaan Herve-Vandamme, Persamaan Reddy, dan Persamaan Kumar dan Singh. Indeks bias diperoleh dengan metode komputasi dengan memberikan input nilai celah energi terlebih dahulu, diikuti dengan persamaan untuk menghitung nilai indeks bias. Nilai indeks bias yang sesuai berdasarkan nilai celah energi dan ketentuan dari tiap persamaan adalah indeks bias dari persamaan Moss dengan indeks bias sebesar 3,533. Nilai indeks bias yang diperoleh memenuhi kriteria celah energi pada persamaan Moss yaitu berada pada rentang $0,17\text{eV} < E_g < 3,68\text{eV}$.

Kata Kunci : Semikonduktor organik, Berilium, Phthalocyanine, Celah Energi, Indeks Bias.

PENDAHULUAN

Akhir-akhir ini Semikonduktor menjadi topik yang banyak diteliti dalam perkembangan sains dan teknologi abad ini. Pemanfaatannya dalam bidang elektronika seperti transistor, dioda, telepon genggam dan kamera menjadi

bahasan yang sangat menarik di bidang teknologi. Berdasarkan jenis bahannya, semikonduktor terdiri dari dua bagian yaitu semikonduktor anorganik dan semikonduktor organik. Semikonduktor anorganik terbuat dari logamdan sangat peka terhadap suhu, sedangkan

semikonduktor organik terbuat dari bahan organik yang dapat diekstrak dari tumbuhan (Raya, 2014). Semikonduktor berbasis material organik memiliki berbagai keuntungan dibandingkan dengan semikonduktor berbasis material anorganik antara lain rendahnya ongkos produksi, dapat dimodifikasi, dapat disintesis dari tumbuhan yang melimpah di Indonesia (Triyana, 2006).

Bagian yang berperan penting dalam pembuatan semikonduktor organik baru adalah bahan organik dan logam yang dikongkasikan pada bahan organik tersebut. Bahan organik yang dipilih adalah bahan yang memiliki kemampuan untuk menyerap foton dari sinar matahari pada panjang gelombang sinar tampak. Hal ini terdapat pada bahan organik Phthalocyanine. Phthalocyanine memiliki kemampuan menyerap foton pada susunan elektron disekeliling inti atomnya. Struktur Phthalocyaninempunyai ikatan rangkap terkonjungsi yang memungkinkan terjadinya proses serapan gelombang elektromagnetik untuk mengeksitasi elektron elektron dari ground-state ke excitation state. Beda energi antara ground-state dengan excitation state mempunyai hubungan yang sangat erat dengan celah energi(Hikmah, 2014). Jenis atom logam yang dikongkasikan pada bahan organik tersebut adalah logam yang memiliki energi ionisasi kecil sehingga akan mudah melepaskan elektron pada saat dikongkasikan dengan bahan organik.. Semakin mudah melepaskan elektron, maka sifat konduktivitasnya akan bertambah. Berilium adalah salah satu logam yang memiliki energi ionisasi kecil. Berilium memiliki nilai energi ionisasi sebesar 899 Kj/mol.

Pada semikonduktor, orbital yang terisi elektron disebut Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO) dan orbital yang tidak terisi disebut Lowest Unoccupied Molecular Orbital (LUMO). Selisih dari kedua energi tersebut dinamakan celah energi. Celah energi dapat dilihat berdasarkan hasil selisih spektra tingkatan energi pada orbital-orbitalnya, yang digambarkan oleh energi HOMO-LUMO. Ditinjau dari celah energinya, suatu bahan dapat dikategorikan sebagai bahan semikonduktor

apabila celah berada diantara interval 0 – 3 eV (Strehlow dan Cook, 1973).

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 yang memiliki korelasi tertentu. Indeks bias optik adalah salah satu sifat dasar dari bahan karena erat kaitannya dengan polarisabilitas elektron ion dan bidang lokal dalam material, yang memainkan peran penting dalam menentukan sifat listrik dari bahan-bahan tersebut. Senyawa semikonduktor memiliki aplikasi potensial dalam bidang elektronik, optik, perangkat optoelektronik dan saat ini dalam nanoteknologi dan bioteknologi.

Banyak hubungan empiris yang berkaitan dengan indeks bias n ke celah energi E_g secara langsung, sedangkan hubungan yang dimaksud untuk menghitung E_g adalah dari elektronegativitas dahulu, kemudian didapat hasil E_g , sehingga nilai n dapat ditentukan. Moss membuat upaya pertama yang saling berhubungan untuk indeks bias dan celah energi dalam semikonduktor dan memberikan hubungan yang umum sebagai

$$E_g = 95eV \tag{1}$$

n = indeks bias optik

E_g =celah energi.

Hubungan ini akan mendapatkan nilai indeks bias dengan nilai celah energi yaitu $0.17eV < E_g < 3.68eV$.

Ravindra et al mengusulkan hubungan linear yang mengatur indeks bias dengan celah energi antara ikatan satu dengan yang lain sebagai

$$n = 4.084 - 0.62E_g \tag{2}$$

Hubungan ini menjadi satu linier pada celah energi yaitu $1.5eV < E_g < 3.5eV$

Berdasarkan teori getaran, Herve dan Vandamme mengusulkan hubungan untuk indeks bias sebagai,

$$n^2 = 1 + (A / (E_g + B))^2 \tag{3}$$

A = energi ionisasi hidrogen(13.6 eV)

B = 3.4 eV adalah konstan.

hubungan ini dapat memperoleh nilai indeks bias dengan nilai celah energi yaitu $2eV < E_g < 4eV$.

Reddy mengusulkan hubungan indeks bias sebagai,

$$n^4(Eg-0.365)=154 \quad (4)$$

Hubungan ini memberikan nilai eksperimental untuk celah energi yaitu $1.1\text{eV} < Eg < 6.2\text{eV}$.

Kumar dan Sing juga memberikan hubungan indeks bias sebagai,

$$n = K Eg^C \quad (5)$$

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

(Triphaty, 2015).

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

METODE PENELITIAN

Penelitian dilakukan menggunakan Komputer dengan spesifikasi Prosesor Intel(R) Celeron(R) 1.60GHz, Random Access Memory (RAM) 2,00 GB. Perhitungan komputasi menggunakan system operasi Windows 7, sedangkan untuk perangkat lunak digunakan *software* hyperchem 8.0 for windows dan *software* Matlab versi 2016. Untuk memodelkan *Be-phthalocyanine* di *software* hyperchem digunakan metode semiempiris ZINDO/1, dan *software* Matlab versi 2016 untuk membuat rancangan program interface.

Hal pertama yang dilakukan yaitu Memodelkan *Be-phthalocyanine* di *software* hyperchem dalam bentuk 2D dan 3D, kemudian dilakukan proses optimasi geometri bertujuan untuk mendapatkan stuktur yang stabil dan tingkat energi yang lebih minimum. Setelah itu dilakukan 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} . Setelah mendapat nilai celah energi hal yang dilakukan selanjutnya yaitu membuat rancangan interface pada Matlab dan membuat koding yang digunakan untuk menghitung nilai indeks bias, yaitu :

- Persamaan Moss :

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

- Persamaan Ravindra et all. :

$$n = 4.084 - 0.62Eg$$

- Persamaan Herve-Vandamme :

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

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

- Persamaan Reddy :

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

- Persamaan Kumar dan Singh :

$$n = K Eg^C$$

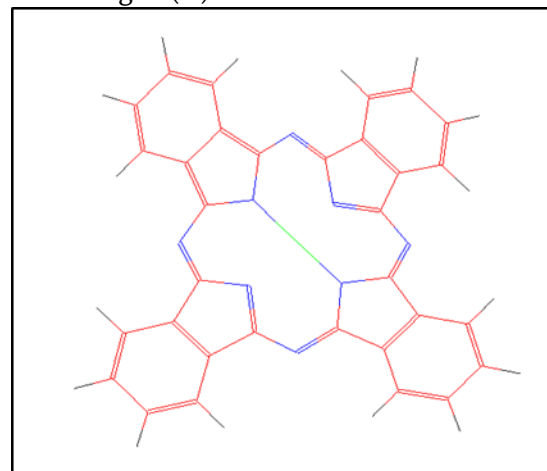
Dimana $K = 3.3668$ dan $C = -0.32234$

Setelah perancangan interface dan kodingselesai, 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.

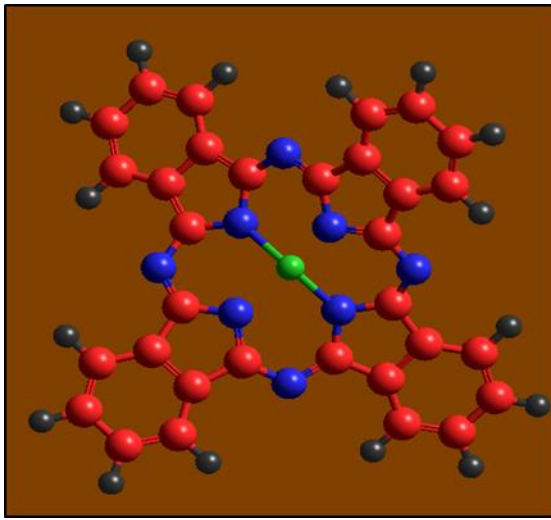
HASIL DAN PEMBAHASAN

A. Kajian Optimasi Geometri *Be-Phthalocyanine*

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



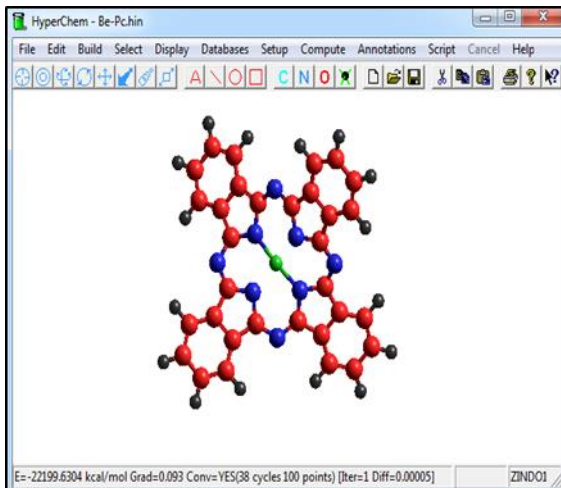
(a)



(b)

Gambar 1. (a) Struktur dan jenis ikatan dari Be-Phthalocyanine Kompleks 2D.; (b) Struktur dan jenis ikatan dari Be-Phthalocyanine Kompleks 3D.

Setelah dilakukan pemodelan Be-Phthalocyanine dalam tiga dimensi, senyawa Be-Phthalocyanine dioptimasi dengan menggunakan metode ZINDO/1. Optimasi ini dilakukan untuk mendapatkan struktur yang paling stabil dengan tingkat energi yang paling minimum.



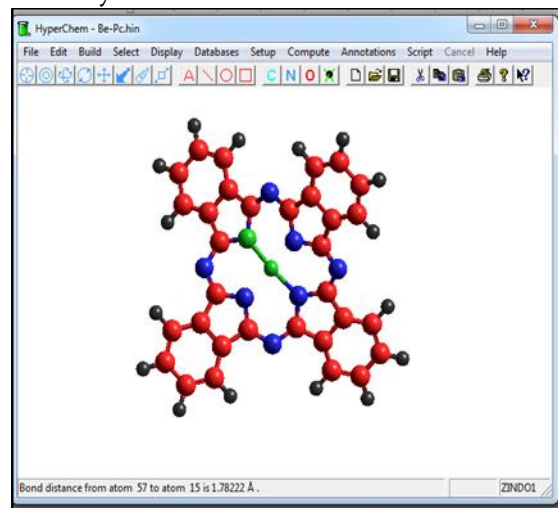
Gambar 2. Be-Phthalocyanine teroptimasi

Be-Phthalocyanine teroptimasi geometri diperoleh pada energi minimum sebesar -22199,6304 kcal/mol, putaran ke 38 titik ke 100. Nilai energi minimum ini mendekati dengan hasil nilai energi minimum pada penelitian sebelumnya Hikmah (2014) pada bahan semikonduktor Ag-Phthalocyanine yaitu -21775,1985 kcal/mol.

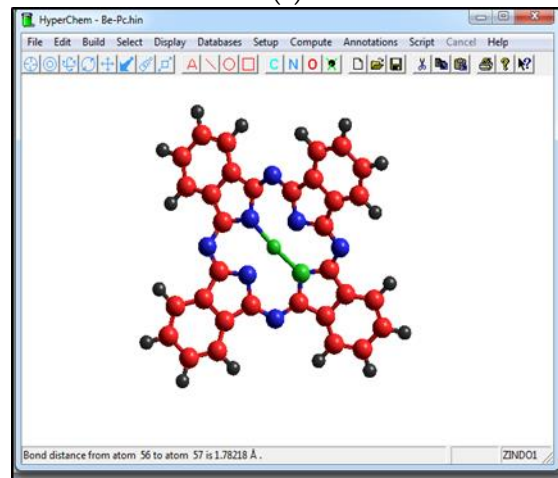
Berdasarkan proses Optimasi Geometri dengan metode ZINDO/1 ini didapat hasil

energi optimasi dari Phthalocyanine dasar yaitu -191683,6466421 kcal/mol, sedangkan struktur Be-Phthalocyanine -22199,6304 kcal/mol. Be-Phthalocyanine lebih stabil karena energi optimasinya lebih kecil dibandingkan Phthalocyanine dasar.

Phthalocyanine terkonjugasi Berilium (Be) termasuk senyawa kompleks. Syarat suatu senyawa dikatakan kompleks apabila memiliki panjang ikatan antara atom pusat dengan atom lainnya hampir bersamaan. Adapun yang menjadi indikator panjang ikatan yaitu posisi atom pusat yang berikatan dengan logam konjungsi yaitu Be. Atom yang berikatan pada atom logam pusat yaitu atom N bernomor 15 dan 57. Berikut data panjang ikatan pada Be-Phthalocyanine :



(a)



(b)

Gambar 3. (a) Panjang ikatan Be(57) – N (16); (b) Panjang ikatan Be(57) – N (56)

Tabel 1. Panjang Ikatan Be- Phthalocyanine

Atom yang Terlibat	Panjang Ikatan (Å)
--------------------	--------------------

Be(57)- N(15)	1,7822
Be(57)- N(56)	1,7821

Dari data yang diperoleh dapat dilihat bahwa panjang ikatan atom pusat Berilium dengan Nitrogen tidak jauh berbeda yaitu berada pada rentang 1,78218Å -1,78222Å. Hal ini disebabkan karena Optimasi geometri akan membuat sudut tolakan maksimum dari atom-atom sehingga panjang ikatan antar atom saling menyesuaikan diri (Hikmah,2014).

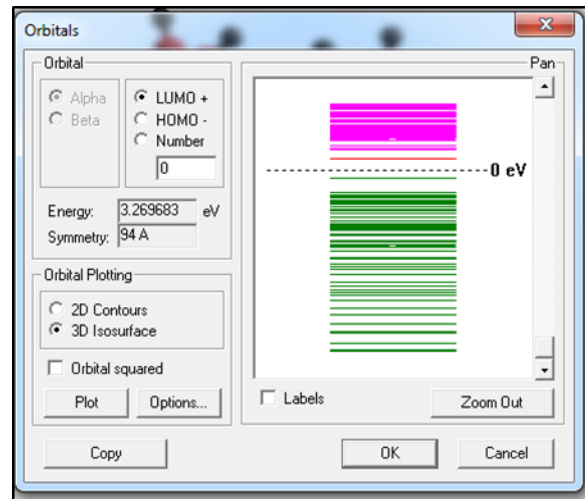
Selain panjang ikatan yang harus berdekatan, untuk menentukan bahwa disuatu senyawa dapat dikatakan sebagai semikonduktor yang baik yaitu memiliki tingkat fleksibilitas yang baik. Semakin besar sudut yang dibentuk oleh atom-atom maka semakin kurang fleksibel molekul yang dibentuk (Gawang,2013).

Sudut ikatan dibentuk dari sudut pada atom pusat dengan dua atom sekelilingnya. Sudut ikatan berpengaruh pada distribusi elektron dalam suatu molekul dan fleksibilitas molekul. Sudut ikatan dapat terlihat pada senyawa Be-Pthalocyanine Sebelum dan sesudah optimasi.

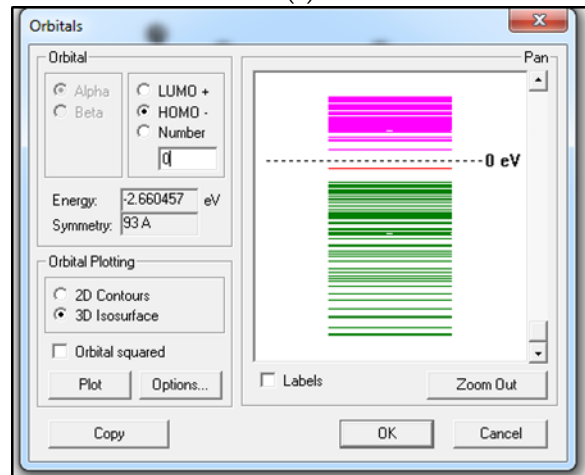
Tabel 2. Besar Sudut Ikatan Be-Pthalocyanine

Atom yang Terlibat	BesarSudut (°)	
	Sebelum Optimasi	Sesudah Optimasi
N(29) – Be (57) – N (56)	155,206°	126,872°

Sebelum dioptimasi besar sudut ikatan adalah 155,206°, dan setelah dioptimasi diperoleh sudut sebesar 126,872° sehingga dapat disimpulkan bahwa Be-Phthalocyanine memiliki tingkat fleksibilitas yang baik. 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 Be-Phthalocyanine diperoleh dari selisih energi HOMO dengan energi LUMO. Adapun energi HOMO dan energi LUMO yang dihasilkan adalah sebagai berikut:



(a)



(b)

Gambar 4. 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 :

$$E_{gap} = E_{LUMO} - E_{HOMO} \quad (6)$$

Pada penelitian ini dengan metode Semiempiris ZINDO/1, didapatkan energi pada pita valensi ataupun energi LUMO sebesar 3,269683eV, energi pada pita konduksi ataupun energi HOMO sebesar 2.660457eV.

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

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

$$E_{gap} = 3,269683 - 2,660457$$

$$E_{gap} = 0,609226$$

Tabel 3. Celah energi Be-Pthalocyanine

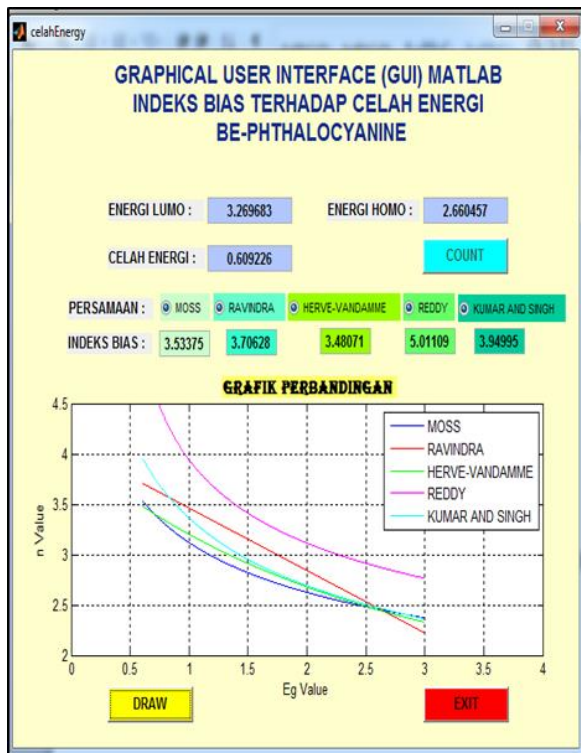
C. Indeks Bias

Indeks bias dan celah energi memiliki hubungan yang dapat menentukan perilaku optik dan elektronik semikonduktor. Indeks bias dapat menurun dengan celah energi. Pada

Celah Energi (E_g)	Indeks Bias				
	Moss	Ravindra et al.	Herve - Vandamme	Reddy	Kumar dan Singh
0,609	3,533	3,706	3,480	5,011	3,949

penelitian ini untuk menghitung indeks bias berdasarkan celah energi digunakan lima persamaan yang saling berkaitan. Nilai indeks bias yang diperoleh dari setiap persamaan yaitu:

Tabel 4. Nilai Indeks Bias berdasarkan Celah Energi



Gambar 5. Grafik perbandingan dari setiap persamaan

Grafik secara umum didapat persamaan dari beberapa relasi indeks bias yaitu nilai

indeks bias menurun dimulai dari nilai celah

Jumlah Atom				Ener gi	Ener gi	Celah Energi (E_g)
C	H	N	B	LUMO	HO	$E_{LUMO} - E_{HOMO}$
3	1	8	1	3,269	2,660	0,609eV

energi 0,0609eV dari diakhiri sampai 3 eV. Perbedaannya yaitu cara menurunnya yang berbeda-beda yaitu linear, kuadrat dan pangkat empat.

Dari kelima persamaan tersebut, telah diketahui bahwa hasil yang diperoleh dari tiap persamaan yang berhubungan memiliki nilai indeks bias yang bersifat eksponensial turun terhadap celah energi pada celah energi kisaran $0,609 < E_g < 3$. Nilai indeks bias yang linier atau tepat berdasarkan jarak celah energi juga mengalami penurunan, yaitu :Moss (3,533); Ravindra et al (3,706); Herve-Vandamme (3,481.); Reddy (5,011); Kumar dan Singh (3,949).

Indeks bias yang dihasilkan untuk memperoleh dari persamaan moss sesuai, karena celah energi E_g yang dihasilkan untuk memperoleh nilai indeks bias berada pada kisaran $0,17eV < E_g < 3,68eV$ dan tidak berada pada $E_g < 0,17 eV$. Indeks bias yang diperoleh dari persamaan Ravindra tidak sesuai, karena indeks bias tidak akan sesuai jika nilai dari celah energi $E_g < 6,587 eV$. Indeks bias yang diperoleh seuai jika nilai dari celah energi $E_g < 1,4eV$. Indeks bias yang diperoleh dari persamaan Reddy tidak sesuai, karena indeks bias tidak akan sesuai jika nilai dari celah energi $E_g < 0,365eV$. 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 $2eV < E_g < 4eV$. Dari penjabaran diatas, Nilai indeks bias yang linear atau sesuai berdasarkan jarak celah energi dan ketentuan dari tiap persamaan adalah indeks bias dari persamaan Moss dengan indeks bias sebesar 3,533.

KESIMPULAN DAN SARAN

Dari hasil penelitian yang dilakukan dapat disimpulkan :

1. Struktur Semikonduktor Organik BePc terdiri dari 1 logam Berilium (Be), serta bahan organik yang terdiri dari 8 atom Nitrogen (N), 18 atom Hidrogen (H) dan 32 atom Karbon (C) yang disebut Phthalocyanine
2. Celah energi ataupun energy gap (E_{gap}) Be-Phthalocyanine yang diperoleh adalah 0,6092 eV, hasil ini memenuhi kriteria bahan semikonduktor dan memiliki kemiripan dengan bahan semikonduktor Germanium (Ge). Dengan demikian Be-Phthalocyanine dapat dijadikan sebagai bahan semikonduktor organik.
3. Indeks bias (n) yang diperoleh dari Persamaan Moss, Ravindra et al, Herve-Vandamme, Reddy, Kumar dan Singh adalah 3,269; 3,706; 3,480; 5,011; 3,94995. Nilai indeks bias yang linier atau sesuai berdasarkan celah energi yaitu $0,3164eV < E_g < 3eV$ dan memenuhi ketentuan dari tiap persamaan adalah indeks bias persamaan Moss dengan indeks bias sebesar 3,269.

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
- Bhadur dan Mishra, (2013), Correlation Between Refractive Index and Electromagativity Difference for ANb8-N Type Binary Semiconductors, ACTA PHYSCA POLONICA Vol.123, India
- Hart, Harold dan Achmadi, S.,(2003),Kimia Organik suatu kuliah singkat, Erlangga, Jakarta
- Hikmah, A., Utomo, S. B. dan Sukardjo, J. S., (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, Erlangga, Jakarta.
- Nasikhudin, (2010), Schottky Contact dan Ohmic Contact pada Persambungan Elektroda Logam dan Semikonduktor Organik, Erlangga, Jakarta
- Pamungkas, G dan Sanjaya, (2013), Kajian Teoritis Untuk Menentukan Celah Energi Porfirin Terkonjugasi Logam Kalsium Menggunakan Teori Fungsi Kerapatan (DFT), UNESA Journal of Chenistry Vol. 3, No.2.
- Pranowo, D. H., (2000), Kimia Komputasi, Universitas Gajah Mada, Yogyakarta.
- Rani, S., (2013), Modul Pelatihan Pemograman MATLAB, HIMPASIKOM UGM, Yogyakarta
- Singh, D., Das, L.N., (2015), A new Coding method in MATLAB used for solving a System of n Linear Equation by LU Decomposition, International Reseach Journal of Engineering and Technology (irjet), Vol.02:626-628
- Raya, I.,(2014), Kimia Anorganik Fisik dan Material, Universitas Hasanuddin, Makassar.
- Sanjaya., Pamungkas, Novita, D, (2014), Karakterisasi Porfirin Terkonjugasi Logam Golongan IIA Sebagai Bahan Baku Fotodetektor, Prosiding Seminar Nasional Kimia ISBN: 978-602-0951-00-3.
- Sanjaya, I.G.M., Pamungkas, Novita, D., (2013), Karakterisasi Berilium Porfirin Sebagai Bahan Dasar Fotodetektor, Prosiding Seminar Nasional Kimia
- Sholihun, (2009), Komputasi Parameter Internal Sel Surya Organik dan Penentuan Pola Keterikatannya Terhadap Intesitas Menggunakan Metode LANBV, FMIPA UGM, Yogyakarta.
- Sitorus, M., (2013), Kimia Organik Fisika, Penerbit Graha Ilmu, Yogyakarta.
- Strehlow, W. H dan Cook, E. L., (1973), Compilation Of Energy Band Gaps In Elemental And Binary Compound Semiconductors And Insulators,

- Journal of Physic Chemical, Ref. Data,
Vol. 2, No. 1.
- Shur, dan Michael, (2002), Physic Of
Semiconductor Devices, Penerbit
Prentice Hall of India, New Delhi.
- Triyana, Kuwat, (2006), Elektronika Organik :
Perkembangan dan Prospeknya,
Prosiding PPI-PDIPTN Batan,
Yogyakarta
- Tripathy, (2015), Refractive Indices of
Semiconductors from Energy gaps,
Indira Gandhi Institute of
Technology, India.
- Yacobi, B. G., (2003), Semiconductor Materials
An Introduction to Basic Principles,
Kluwer Academic/Plenum Publisher,
New York
- Zenkevich, E. I., Gaponenko, S. V., Sagun, E.I
dan Von, Borczyskowki, (2013),
Bioconjugates Based On
Semiconductor Quantum Dots And
Porphyrin Ligands: Properties,
Excitation Relaxation Pathways And
Singlet Oxygen Generation Efficiency
For PDT Applications, National
Technical University of Belarus,
Nezavisimosti Ave.
- Zerner, M.,(1991), Review in Computational
Chemistry, Eds. K.B Lipkowitz and D.
Boyd, VCH 313-320.