



## Studi Penentuan Semikonduktor Melalui Kajian Celah Energi Kompleks Senyawa Be-Porfirin Menggunakan Metode Komputasi Semiempiris ZINDO/1

**Alkhafi Maas Siregar dan Hendro Jansya Sinaga**

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

*alkhafimaas@gmail.com*

*Diterima Desember 2016; Disetujui Januari 2017; Dipublikasikan Februari 2017*

### ABSTRAK

Telah dilakukan penelitian untuk menentukan celah energi dari Be-Porfirin yang dapat digunakan sebagai bahan semikonduktor dan menganalisis penyerapan inframerah dari Be-Porfirin. Penelitian ini menggunakan software Hyperchem versi 8.0 untuk Windows 7. Celah energi dan analisis penyerapan inframerah dari Be-Porfirin diperoleh dengan metode komputasi semiempiris ZINDO/1. Adapun celah energi dihitung dari selisih energi pada energi HOMO ( Highest Occupied Molecular Orbital) dan energi LUMO ( Lowest Unoccupied Molecular Orbital ). Energi HOMO yang dihasilkan sebesar 3,535352 eV dan energi LUMO sebesar 3,856724 eV, sehingga celah energinya sebesar 0.321372. Be-Porfirin yang diberi radiasi inframerah akan menyerap energi yang mampu mengeksitasi elektron dari pita valensi menuju pita konduksi. Energi foton yang diserap harus lebih besar dari celah energi yang dihasilkan. Be-Porfirin menyerap energi foton pada panjang gelombang 2,04  $\mu\text{m}$  -2,11  $\mu\text{m}$ . Sesuai dengan literatur, semikonduktor memiliki celah energi  $0 < E_g < 3$ . Sehingga dapat disimpulkan bahwa Be-Porfirin dapat dijadikan sebagai bahan semikonduktor organik dan memiliki kemiripan dengan bahan semikonduktor lead selenide(PbSe). Be-Porfirin menyerap baik sinar infra merah pada area mid infrared sehingga dapat diaplikasikan dalam pembuatan sensor dalam area mid infrared.

**Kata kunci :** Semikonduktor Organik, Porfirin, Hyperchem versi 8.0, celah energi, Inframerah

### PENDAHULUAN

Ilmu pengetahuan dan teknologi informasi mengalami kemajuan yang sangat pesat, sehingga kebutuhan akan informasi yang cepat, tepat dan akurat sangat dibutuhkan oleh setiap perusahaan, instansi, organisasi maupun bidang lainnya. Teknologi informasi merupakan hasil rekayasa manusia terhadap pengolahan data dan perhitungan-perhitungan yang cukup rumit. Salah satu produk dari pengetahuan dan teknologi adalah komputer. Komputer banyak digunakan sebagai alat bantu untuk mengolah

data dan berbagai macam keperluan termasuk dalam penelitian sains untuk mempermudah, meminimalisir biaya dan mempersingkat waktu dalam penelitian. Contohnya dalam penelitian bahan semikonduktor yang membutuhkan waktu yang cukup lama dan biaya yang mahal. Sehingga digunakan metode komputasi dalam pengolahannya.

Kajian terhadap celah energi akan mengarahkan pada pemanfaatan bahan/molekul tersebut sebagai pengembangan aplikasi bahan semikonduktor. Ditinjau dari celah energinya,

suatu bahan dapat dikatakan bahan semikonduktor, apabila celah energinya berada diantara interval 0 eV- 3 eV. Semikonduktor organik telah banyak diteliti dengan menggunakan metode komputasi. Pada Sudanti (2006) dilakukan kajian terhadap *Ag-Porphyrin*, menggunakan ZINDO/1 melalui eksperimen komputer. Hasil kajian menunjukkan bahwa kompleks *Ag-Porphyrin* mempunyai celah energi sebesar 2,12 eV, daya serap inframerah dengan intensitas serapan 5,08  $\mu\text{m}$ . Perak memiliki konduktivitas termal tinggi, logam perak memiliki kontak terendah resistansi dari logam perak memiliki reflektivitas optik logam tertinggi.

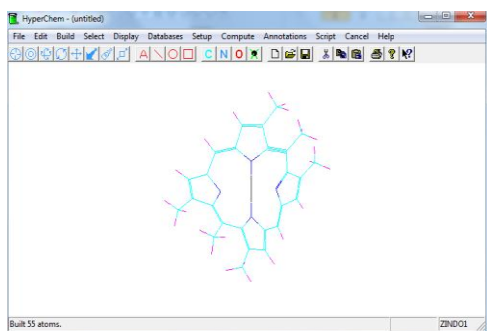
### METODE PENELITIAN

Penelitian ini menggunakan satu buah laptop dengan spesifikasi Prosesor AMD E1-1200 APU with Radeon (tm) HD Graphics (2 CPUs), 1.4GHz dan satu buah software Hyperchem Versi 8.0 untuk Windows 7. Proses perhitungan akan dimulai dari pemodelan molekul, optimasi geometri, setelah dilakukan optimasi maka selanjutnya menghitung celah energi lalu menghitung penyerapan inframerah.

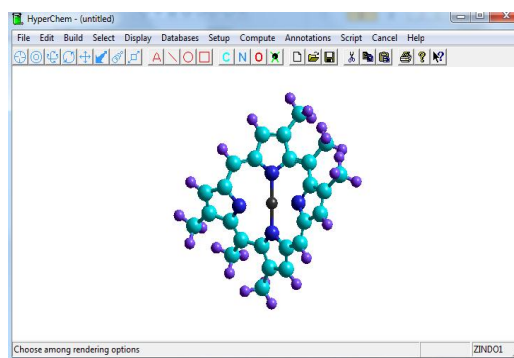
### HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN

#### 1. Model Molekul Be-Porfirin

Pemodelan molekul dilakukan dengan menggunakan software hyperchem versi 8.0. Pemodelan dilakukan dengan memasukkan data penyusun senyawa Be-Porfirin yaitu dengan cara klik build lalu pilih default element, lalu masukkan atom berikut : 1 atom Berilium (Be), 26 atom Karbon (C), 24 atom Hidrogen (H), dan 4 atom Nitrogen. Pada gambar berikut ditampilkan hasil pemodelan Be-Porfirin dalam dua dan tiga dimensi :



Gambar 1. Model Be-Porfirin 2D



Gambar 2. Model Be- Porfirin 3D

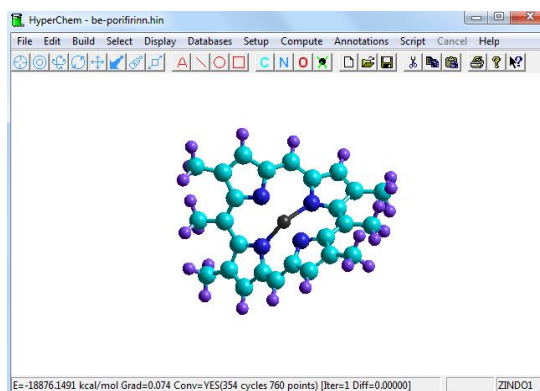
Panjang ikatan atom Be dengan atom terdekat dapat dilihat pada tabel :

Tabel 1. Panjang Ikatan Atom Be dengan atom terdekat

Atom yang Terlibat	Panjang Ikatan ( $\text{A}^0$ )
Be (1)- N (12)	1.70662 $\text{A}^0$
Be(4) – N (11)	1.71296 $\text{A}^0$

#### 2. Optimasi Geometri

Setelah dilakukan pemodelan Be-Porfirin dalam tiga dimensi, senyawa *Be-Porfirin* 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 Be-Porfirin :



Gambar 3. Hasil Optimasi Geometri

Be-Porfirin teroptimasi geometri diperoleh pada energi minimum sebesar - 18876.1491 kcal/mol, putaran ke 354 titik ke 760 dan iterasi =1. Sudut Atom sebelum dan sesudah optimasi

mengalami perubahan dan ditampilkan pada tabel berikut :

**Tabel 2.** Sudut atom sebelum dan sesudah optimasi

Atom yang terlibat	Besarnya sudut ( ° )	
	Sebelum optimasi	Setelah optimasi
N (11) – Be (1) – N(12)	178.017 <sup>0</sup>	148.185 <sup>0</sup>

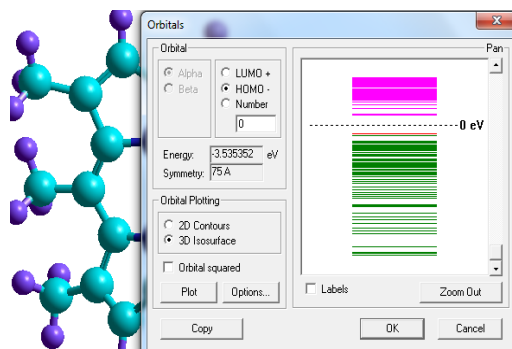
### 3. Celah Energi

Salah satu cara untuk menentukan suatu bahan dapat dijadikan sebagai bahan semikonduktor adalah dengan mengkaji celah energi suatu bahan tersebut. Suatu bahan dapat dikatakan semikonduktor jika memiliki celah energi antara 0 eV – 3 eV. Celah energi yang tidak terlalu besar, maka eksitasi sangat memungkinkan bagi elektron untuk bergerak dari pita valensi ke pita konduksi melewati celah energi tersebut.

Pada penelitian ini untuk menghitung celah energi digunakan metode ZINDO/1. Celah energi pada metode ini dilihat berdasarkan hasil spektra tingkatan energi pada orbital-orbitalnya. Hal ini digambarkan oleh energi HOMO-LUMO. Celah energi merupakan perbedaan tingkatan energi antara energi HOMO terhadap LUMO, yang dinyatakan dengan :

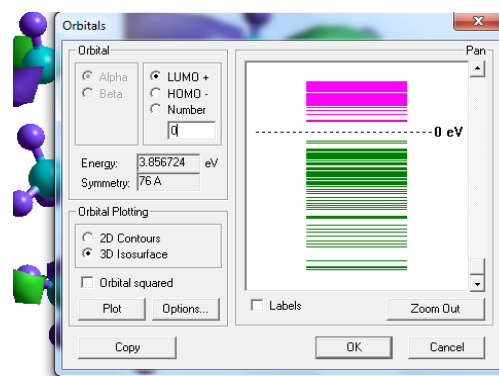
$$E_{gap} = E_{lumo} - E_{homo}$$

Bagian teratas dari keadaan yang ditempati oleh elektron pada pita valensi disebut (Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO)). HOMO merupakan pita valensi dalam kajian semikonduktor. Daerah HOMO pada Be-Porfirin yaitu Porifirin. Porifirin terdiri dari 4 atom Nitrogen (N) yang memiliki empat pasang elektron yang akan didonorkan kepada Berilium (Be). Bagian terbawah dari keadaan yang tidak ditempati oleh elektron pada pita konduksi disebut *Lowest Occupied Molecular Orbital* (LUMO). LUMO diibaratkan pada pita konduksi dalam kajian semikonduktor. Daerah LUMO pada Be-Porfirin yaitu Berilium (Be). Energi LUMO dan Energi HOMO ditampilkan pada gambar berikut



**Gambar 4.** Energi HOMO

Pada gambar 4 menunjukkan hasil perhitungan energi HOMO dari Be-Porfirin. Adapun energi HOMO yang diperoleh sebesar 3.535352 eV.



**Gambar 5.** Energi LUMO

Pada gambar 5 menunjukkan hasil energi LUMO Be- Porifirin. Energi LUMO yang dihasilkan adalah 3.856724 eV. Maka dengan hasil energi LUMO dan HOMO di atas didapatkan hasil celah energi sebesar :

$$E_{gap} = E_{Lumo} - E_{Homo}$$

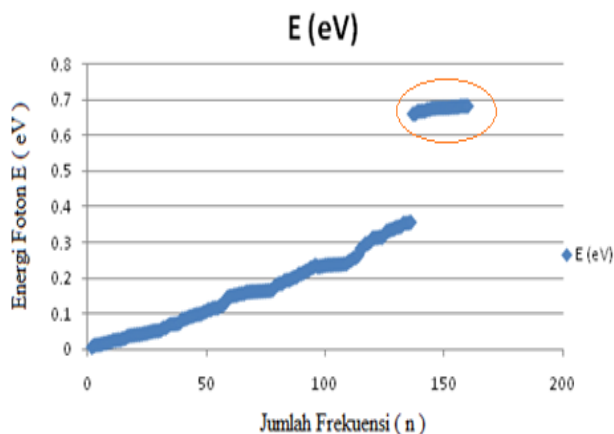
$$E_{gap} = 3.856724 \text{ eV} - 3.535352 \text{ eV.}$$

$$E_{gap} = 0,321372 \text{ eV}$$

### 4. Kajian Spektra Infra Red (IR)

Semikonduktor organik yang dipadu dengan logam seperti Be-Porfirin, jika ditembak atau disinari oleh cahaya ataupun gelombang elektromagnetik mengakibatkan terdapatnya sejumlah energi yang akan diserap dan ditransmisikan. Pada penelitian ini jenis gelombang elektromagnetik yang diradiasikan adalah inframerah. Inframerah meradiasi Be-Porfirin pada panjang gelombang 2,04 μm – 319,48 μm. Saat Be-Porfirin ditembak maka akan ada energi yang diserap. Energi

tersebutlah yang akan mengeksitasi elektron agar dapat berpindah dari pita valensi menuju pita konduksi. Persyaratan bagi elektron agar dapat mencapai pita konduksi adalah energi yang diterima harus lebih besar ataupun sama dengan celah energi ( $h\nu \geq E_g$ ). Penyerapan inframerah pada Be-Porfirin dapat dilihat pada gambar berikut :



**Gambar 6.** Grafik Energi foton

Pada grafik tersebut, dengan panjang gelombang  $2,04 \mu\text{m} - 2,11 \mu\text{m}$ , didapatkan bahwa Be-*porfirin* menyerap sinar inframerah pada energi  $0,661338569 \text{ eV} - 0,68328061 \text{ eV}$  yang ditandai dengan lingkaran merah tersebut, . Daerah tersebut memasuki area mid inframerah yaitu  $1,5 \mu\text{m} - 10 \mu\text{m}$ , sehingga dapat dimanfaatkan sebagai sensor pada rentangan area *mid-infrared*.

#### KESIMPULAN DAN SARAN

Bentuk molekul Be-Porfirin sebelum dan setelah dilakukan optimasi mengalami perubahan, dimana sudut atom Be dengan N sebelum dilakukan optimasi sebesar  $178,017^\circ$ , sedangkan setelah dilakukan optimasi, sudut ikatan mengecil menjadi  $148,185^\circ$ , celah energi ataupun *energy gap* ( $E_{gap}$ ) yang diperoleh dengan metode semiempiris Zindo/1 adalah  $0,321372 \text{ eV}$  berbeda agak jauh dengan yang dilakukan sanjaya pada tahun 2013 dengan metode teori fungsional kerapatan, mendapatkan celah energi Be-*Porfirin* sebesar  $1,11 \text{ eV}$ , dan Energi Foton yang memenuhi syarat untuk mengeksitasi elektron berada pada panjang gelombang  $2,04 \mu\text{m} - 2,11 \mu\text{m}$ . Sesuai dengan literatur daerah tersebut memasuki area mid inframerah ( $1,5 \mu\text{m} - 10 \mu\text{m}$ ), sehingga dapat dimanfaatkan sebagai sensor pada

rentangan daerah *mid-infrared*. Berdasarkan penelitian yang dilakukan, peneliti memberi saran untuk penelitian selanjutnya, antara lain perlu dilakukan simulasi dengan menggunakan jenis logam yang berbeda, pengujian dengan basis yang berbeda seperti pengujian dengan eksperimen, dan juga perlu dilakukan pengujian dengan teori.

#### DAFTAR PUSTAKA

- Hikmah, A., Utomo, S.B., Sukardjo., (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
- Pamungkas, G., Sanjaya, G.M., (2013), *Kajian Teoritis Untuk Menentukan Celah Energi Porfirin Terkonjugasi Logam Kalsium Menggunakan Teori Fungsional Kerapatan (DFT)*, *UNESA Journal of Chemistry*, **2** (1) :54-61
- Sanjaya, I.G.M., Pamungkas, G., Novita, D., (2014) *Karakterisasi Porfirin Terkonjugasi Logam Golongan IIA Sebagai Bahan Baku Fotodetektor*, *Prosiding Seminar Nasional Kimia, FMIPA Universitas Negeri Surabaya*
- Sanjaya, I.G.M., Pamungkas, G., Novita, D., (2013) *Karakterisasi Berilium Porfirin Sebagai Bahan Dasar Fotodetektor*, *Prosiding Seminar Nasional Kimia*