

# Perkembangan

Bidang Sosial Humaniora  
Pertanian dan Teknologi  
Mendukung Sustainable  
Development Goals



**PERKEMBANGAN BIDANG  
SOSIAL HUMANIORA,  
PERTANIAN DAN TEKNOLOGI**

**MENDUKUNG SUSTAINABLE  
DEVELOPMERT GOALS**

Penulis

Erni Ummi Hasanah, dkk



**PERKEMBANGAN BIDANG SOSIAL HUMANIORA,  
PERTANIAN DAN TEKNOLOGI Mendukung  
Sustainable Development Goals**

© Penerbit Kepel Press

Penulis :

Kusmaryati D. Rahayu, Dyah Ayu,  
Ernawati, Danang Sunyoto,  
Yanuar Saksono, Fitri Ariyani,  
Febrianti Sianturi, Rina Ekawati,  
Sri Suwarni, Sri Hendarto Kunto  
Hermawan, Rini Raharti,  
Aditya Kurniawan, Bimo Harnaji,  
Takariadinda Diana Ethika, Suswoto,  
Jalu Pangestu, R. Murjiyanto, Yuli Nur  
Hayati, Wiwin Budi Pratiwi, Lia Lestiani,  
Hartanti, Heni Anugrah, Danang  
Wahyudi, Erni Ummi Hasanah, Tsulist  
Anna Muslihatun, Sunarya Raharja, FR  
Harjiyatni, Puji Priksatna, Dyah Rosiana  
Puspitasari, Yuli Sri Handayanil, Endang  
Sulistyaningsih, Rendradi Suprihandoko,

Marhaenia Woro Srikandi, Nurwiyanta,  
Kartinah, Danang Wahyudi, Js. Murdomo,  
Muhamad Nasruddin Manaf, Feri Febria  
Laksana, Mochamad Syamsiro, Puji  
Puryani, Frans Teza Akbar, Ummu Hafizah  
Izhawa, Pantja Siwi V R Ingesti, Sudu  
Anggara Tri Harjanta,  
Mochamad Syamsiro, Syahril Machmud,  
Rahma Dini, Risdiyanto, Ishviati Joenaini  
Koenti, Vinny Victoria, Paryadi,  
Teo Jurumudi, R. Tri Yuli Purwono,  
Bonaventura Agung Sigit Pambudi,  
Sukirno, Endang Sulistyaningsih,  
Erni Ummi Hasanah, Danang Wahyudi,  
Tsulists Anaa Mushlihatun,  
Nur Widyawati

Desain Sampul:  
Emmanuella Regina

Desain Isi:  
Resida Simarmata

Cetakan Pertama, Februrair 2023

Diterbitkan oleh Penerbit Kepel Press  
Puri Arsita A-6, Jl. Kalimantan, Ringroad Utara, Yogyakarta  
email: amara\_books@yahoo.com

Telp/faks : 0274-884500

Hp : 081 227 10912

**Anggota IKAPI**

**ISBN: 978-602-356-505-4**

**Hak cipta dilindungi Undang-Undang**

Dilarang mengutip atau memperbanyak sebagian atau seluruh isi buku,  
tanpa izin tertulis dari penulis dan penerbit.

Percetakan Amara Books  
Isi di luar tanggung jawab percetakan

## KATA PENGANTAR

Puji syukur kehadiran Tuhan Yang Maha Esa atas kuasaNya sehingga kami dapat menyusun dan menerbitkan Book Chapter dengan judul “Perkembangan Bidang Sosial Humaniora, Pertanian dan Teknologi mendukung *Sustainable Development Goals*”. Konsep *Sustainable Development* saat ini memiliki fokus pada pembangunan ekonomi, pembangunan sosial dan perlindungan lingkungan untuk generasi mendatang. Prinsip *Sustainable Development* adalah terpenuhinya kebutuhan hidup manusia dengan memanfaatkan sumber daya alam tanpa merusak lingkungan alam sekitar.

Book chapter ini merupakan kompilasi berbagai tulisan dari para penulis yang ahli dalam Bidang Sosial Humaniora, Pertanian dan Teknologi yang tersusun dalam 26 bab. Buku ini diterbitkan dengan tujuan untuk menyebarluaskan ilmu pengetahuan. Tulisan-tulisan di dalam buku ini diharapkan dapat menambah referensi dan wawasan tentang upaya dukungan terhadap tujuan pembangunan berkelanjutan (*Sustainable Development Goals*).

Dalam proses penulisan dan penyusunan *book chapter* ini tidak lepas dari bantuan berbagai pihak. Untuk itu kepada semua pihak yang terlibat disampaikan terima kasih. Disadari bahwa dalam penyusunan *book chapter* ini masih banyak kekurangan, oleh karena itu jika ada masukan dan saran yang membangun akan diterima sebagai upaya perbaikan dan penyempurnaan *book chapter* ini.

Ketua LP3M  
Universitas Janabadra

Dr. Erni Umami Hasanah, SE.,M.Si



## DAFTAR ISI

Kata Pengantar .....	iii
Daftar Isi .....	v
Kinerja Pegawai: Stres, Motivasi Dan Evaluasi Kerja (Studi Kasus Pada Kantor Pelayanan Pajak Daerah Kabupaten Kulon Progo) <i>Kusmaryati D. Rahayu<sup>1</sup>, Dyah Ayu Ernawati<sup>1</sup></i> .....	1
Peran Keadilan Distributif dan Keadilan Prosedural pada Efektifitas Organisasi dengan Keterikatan Karyawan sebagai Mediasi <i>Danang Sunyoto<sup>1</sup>, Yanuar Saksono<sup>1</sup>, Fitri Ariyani<sup>1</sup></i> .....	19
Pertumbuhan dan Biomassa Bibit Kelapa Sawit pada Volume Penyiraman dan Pemberian Urin Kambing <i>Febrianti Sianturi<sup>1</sup>, Rina Ekawati<sup>2</sup></i> .....	44
Kajian Yuridis Tentang Perceraian dan Pembagian Harta Perkawinan Terhadap Putusan Perkara Nomor: 18/ Pdt.G/2022/PN. Smn. <i>Sri Suwarni<sup>1</sup>, Sri Hendarto Kunto Hermawan<sup>1</sup></i> .....	61
Penyelesaian Sengketa Informasi Publik Di Komisi Informasi Daerah DIY Di Masa Pandemi Covid-19 <i>Takariadinda Diana Ethika<sup>1</sup>, Suswoto<sup>1</sup>, Jalu Pangestu<sup>1</sup></i> .....	86

Kriteria Usaha Mikro Dan Kecil Sebagai Batasan Dalam Pendirian PT Perorangan <i>R. Murjiyanto<sup>1</sup>, Yuli Nur Hayati<sup>1</sup></i> .....	105
Penyelesaian Perselisihan Hubungan Industrial Selama Masa Pandemi Covid di Kota Yogyakarta <i>Wiwin Budi Pratiwi<sup>1</sup>, Lia Lestiani<sup>1</sup></i> .....	123
Penyelesaian Terhadap Anak Yang Melakukan Tindak Pidana Kekerasan Seksual (Studi Kasus di Klaten) <i>Hartanti<sup>1</sup>, Heni Anugrah<sup>1</sup></i> .....	139
Pengaruh Kualitas Layanan Dan Citra Perusahaan Terhadap Loyalitas Pelanggan Melalui Mediasi Kepuasan Pelanggan <i>Danang Wahyudi<sup>1</sup>, Erni Ummi Hasanah<sup>2</sup>, Tsulist Anna Muslihatun<sup>3</sup></i> .....	153
Upaya Pengendalian Pencemaran Lingkungan Akibat Limbah Domestik Di Sungai Winongo Kota Yogyakarta <i>Sunarya Raharja<sup>1</sup>, FR Harjiyatni<sup>1</sup>, Puji Prikhatna<sup>1</sup></i> .....	172
Roving Ambassador dalam Perspektif Hukum Diplomatik Konsuler <i>Dyah Rosiana Puspitasari<sup>1</sup></i> .....	185
Kajian Yuridis Sosiologis Terhadap Pernikahan Usia Dini Di Masa Pandemi Covid-19 <i>Yuli Sri Handayani<sup>1</sup>, Endang Sulistyaningsih<sup>1</sup></i> .....	206
Faktor Faktor Penyebab Terpidana Korupsi Tidak Membayar Uang Pengganti Dalam Perkara Korupsi di Kota Yogyakarta <i>Rendradi Suprihandoko<sup>1</sup>, Marhaenia Woro Srikandi<sup>1</sup></i> .....	216

Analisis Produktivitas Mesin Cetak Offset Pada Perusahaan Percetakan Buku Di Yogyakarta <i>Nurwiyanta<sup>1</sup>, Kartinah<sup>1</sup>, Danang Wahyudi<sup>1</sup></i> .....	230
Pelaksanaan Rehabilitasi Medis bagi Penyalahguna Narkotika Dalam Masa Pandemi Covid 19 di Lembaga Pemasyarakatan Narkotika Kelas II Yogyakarta <i>Js. Murdomo<sup>1</sup></i> .....	243
Monolayer Silicene Apakah Stabil? : Simulasi Menggunakan First-Principles <i>Muhamad Nasruddin Manaf<sup>1</sup>, Feri Febria Laksana<sup>2</sup>, Mochamad Syamsiro<sup>3</sup></i> .....	266
Kajian Yuridis Penempatan Klausula Baku dan Perlindungan Hukum terhadap Debetur pada Pinjaman Online <i>Puji Puryani<sup>1</sup>, Frans Teza Akbar<sup>1</sup></i> .....	279
Pengaruh Pemberian Tetes Tebu Pada Tanaman Tebu Keprasan (Ratoon Cane) sebagai Pupuk Organik <i>Ummu Hafizah Izhawa<sup>1</sup> dan Pantja Siwi V R Ingesti<sup>2</sup></i> .....	299
Analisis Kinerja Prototipe Mesin Pembangkit Listrik Piko Hidro Terapung 12 Sudu <i>Anggara Tri Harjanta<sup>1,2</sup>, Mochamad Syamsiro<sup>1</sup>, Syahril Machmud<sup>1</sup></i> .....	317
Karakteristik Parkir Sepeda Motor di Pasar Tradisional dan Pengembangan Desain Parkir menurut Perspektif Pengunjung <i>Rahma Dini<sup>1</sup>, Risdiyanto<sup>1</sup></i> .....	334
Komparasi Putusan Pengadilan Tata Usaha Negara Terhadap Gugatan Keputusan Fiktif Negatif, Permohonan Terhadap Keputusan Fiktif Positif Dan Perubahannya Pasca Undang-Undang Cipta Kerja <i>Ishviati Joenaini Koenti<sup>1</sup>, Vinny Victoria Tanawani<sup>1</sup></i> .....	348



Peranan Mediator dalam Penyelesaian Perselisihan Hubungan Industrial Masa Pandemi Covid-19 di Kabupaten Sleman <i>Paryadi<sup>1</sup>, Teo Jurumudi<sup>2</sup></i> .....	369
Kajian Yuridis Tentang Perjanjian Tindakan Bedah Plastik Estetik Pada Layanan Klinik Bedah Plastik <i>R. Tri Yuli Purwono<sup>1</sup>, Bonaventura Agung Sigit Pambudi<sup>2</sup></i> .....	382
Analisis Yuridis Urgensi Pembentukan Peraturan Daerah Tentang Garis Sempadan Di Kabupaten Kebumen <i>Sukirno<sup>1</sup>, Endang Sulistyaningsih<sup>1</sup></i> .....	397
Pengaruh Infrastruktur Ekonomi dan Sosial terhadap Produktivitas Ekonomi 13 Provinsi di Indonesia Timur <i>Erni Umami Hasanah<sup>1</sup>, Danang Wahyudi<sup>2</sup>, Tsulists Anaa Mushlihatun<sup>3</sup>, Nur Widayawati<sup>4</sup></i> .....	419

# MONOLAYER SILICENE APAKAH STABIL? : SIMULASI MENGGUNAKAN *FIRST-PRINCIPLES*

Muhamad Nasruddin Manaf<sup>1</sup>, Feri Febria Laksana<sup>2</sup>,  
Mochamad Syamsiro<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Program Studi Teknik Elektro, Fakultas Teknologi Informasi,  
Universitas Nahdlatul Ulama Yogyakarta,

<sup>2</sup> Program Studi Teknik Komputer, Fakultas Teknologi Informasi,  
Universitas Nahdlatul Ulama Yogyakarta, Yogyakarta.

<sup>3</sup> Jurusan Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Janabadra,  
Yogyakarta.

Yogyakarta. Email: manaf@unu-jogja.ac.id

## ABSTRACT

*Research about 2D materials has attracted many attentiton since the successfull of encapsulation of Graphene for Field Effect Transistor. The Graphene shows remarkable properties due to its linear dispersion of the electronic structure. Silicene, the Graphene-like 2D allotrope of silicon has attracted a lot attention since decade ago due to remarkable properties same with the Graphene. Silicene has a benefit instead of Graphene due to easily integrated with current silicon technology. Silicene also form as a slab with buckling compare with Graphene which is just a planar slab. The buckling structure of silicene and its spin orbit coupling induce controllable opening band gap using Electric Field, which is promising for topological quantum computing. Unfortunately, normally silicene growth on substrate such as Ag(111), Au(111), ZrC(111) and never produce in freestanding state. In this paper we study theoretically the stability of freestanding silicene. We use a first-principles calculation to determine the atomic configuration of silicene with a variation lattice constant. Silicene energetically shows unstalbe for freestanding state.*

*We found that the buckling of silicene got an influence from the size of a lattice constant. Therefore, the buckling and the lattice constant of silicene are merely influenced by the substrate.*

**Keywords:** *Buckling; Freestanding; Lattice; Silicene; Unstable.*

## ABSTRAK

Riset tentang material dua dimensi telah menarik banyak perhatian sejak keberhasilan enkapsulasi Graphene yang kemudian digunakan untuk *Field Effect Transistor*. Graphene memiliki sifat-sifat yang luar biasa terkait dengan dispersi linear pada struktur elektroniknya. Silicene yang merupakan allotrope dua dimensi yang mirip dengan Graphene telah menarik banyak perhatian sejak satu dekade lalu terkait dengan sifat-sifat yang istimewa seperti yang ada pada Graphene. Silicene memiliki keuntungan karena dapat dengan mudah diintegrasikan dengan teknologi silikon saat ini. Silicene berbentuk sebagai sebuah bidang dengan benjolan dibandingkan dengan Graphene yang hanya berupa bidang datar saja. Struktur benjolan pada silicene dan kopling dari spin orbit mempengaruhi celah tenaga yang dapat dikendalikan dengan medan listrik, dimana hal ini menjajikan untuk diaplikasikan pada komputer kuantum topologi. Akan tetapi, normalnya silicene tumbuh di atas substrat seperti Ag(111), Au(111), ZrC(111) dan tidak pernah diproduksi dalam bentuk lembaran bebas. Dalam tulisan ini akan dipelajari secara teoritik stabilitas dari lembaran bebas silicene. Metode perhitungan *First-Principles* digunakan untuk menentukan konfigurasi atom-atom dari silicene dengan menggunakan beragam konstanta kisi. Secara energi, silicene menunjukkan ketidakstabilan pada keadaan lembaran bebas. Kita dapatkan benjolan pada silicene dipengaruhi oleh ukuran dari konstanta kisi. Oleh karenanya benjolan dan konstanta kisi pada silicene hanya dipengaruhi oleh substrat yang digunakan.

**Kata kunci:** Benjolan; Ketidakstabilan; Kisi; Lembaran; Silicene.

## PENDAHULUAN

Penelitian tentang material dua dimensi telah menarik banyak perhatian grup riset di seluruh dunia sejak keberhasilan enkapsulasi Graphene dan selanjutnya digunakan untuk *Field Effect Transistor* (FET) [1], [2]. Berbagai sifat luar biasa dari Graphene muncul akibat dari sifat elektronik yang tidak biasa, yakni adanya dispersi linear pada pita energi [1]-[3]. Silicene yang merupakan allotrope dua dimensi silikon yang mirip dengan Graphene telah menarik banyak perhatian peneliti sejak satu dekade lalu [4]-[16]. Silicene memiliki sifat-sifat elektronik yang terdapat pula pada Graphene karena silicene memiliki dispersi yang linear pula pada pita energinya [4], [5]. Silicene akan mudah diintegrasikan dengan teknologi silikon masa kini. Hal ini dimungkinkan karena silicene tersusun dari atom-atom silikon, dibandingkan dengan Graphene yang tersusun dari atom-atom karbon. Selain itu, silicene mempunyai struktur yang agak bergelombang atau dikenal dengan adanya *buckling*/benjolan. Struktur *buckling* tersebut tidak muncul pada Graphene yang hanya berwujud sebagai planar atau bidang datar. Keberadaan *buckling* tersebut memunculkan kopling dari spin orbit dari elektron. Hal ini memunculkan celah tenaga yang dapat dikendalikan dengan medan listrik eksternal (*gate voltage*), sehingga memberikan silicene peluang sebagai kandidat untuk diaplikasikan sebagai komputer kuantum.

Silicene pertama kali diprediksi keberadaannya oleh Kyozauro Takeda dan Kenji Shiraishi di tahun 1994 [4]. Dalam penelitiannya, Takeda dan Shiraishi memodelkan sebagai *freestanding* atau lembaran bebas, serta menyebut silicene sebagai *aromatic stage* dari silikon yang berbentuk bidang atau planar namun memiliki struktur *buckling* seperti yang kita kenal saat ini. Selain struktur geometrinya, Takeda dan Shiraishi berhasil menunjukkan struktur elektronik silicene dengan dispersi linear atau nantinya dikenal sebagai Dirac Cone (DC). Namun penelitian keduanya belum

mendapatkan perhatian secara khusus hingga Cahangirov dkk mempublikasikan hasil penelitiannya secara independen tentang struktur atom dan struktur elektronik dari silicene tersebut [5]. Hasil yang diperoleh Cahangirov dkk menunjukkan hasil yang sama disampaikan oleh Takeda dan Shiraishi.

Silicene dapat disintesis menggunakan metode *Molecular Beam Epitaxy* pada beberapa substrat [6]- [8]. Beberapa eksperimen yang dilakukan skala laboratorium saat ini menggunakan Ag(111) sebagai substrat untuk menumbuhkan silicene. Hasil observasi pada laporan-laporan awal penggunaan Ag(111) sebagai substrat menunjukkan keberadaan dispersi linear atau DC pada struktur elektronik silicene [9]-[10]. Terlepas adanya interaksi antara silicene dengan Ag(111) sebagai substrat. Beberapa hasil eksperimen lainnya menunjukkan DC tidak teramati. Sehingga disimpulkan bahwa substrat Ag(111) dapat merusak sifat elektronik asli dari silicene tersebut [11]- [13]. Substrat lainnya yang baru digunakan saat ini adalah Au(111) [14]-[16]. Laporan awal tentang silicene yang ditumbuhkan pada Au(111) menunjukkan keberadaan DC dan celah tenaga sebesar kurang lebih 0.5 eV [14]. Silicene pada substrat tersebut teramati memanjang atau adanya *strain* sebesar tujuh persen [15], [16]. Stepniak-Dybala dkk menunjukkan dengan adanya *strain* tersebut maka silicene berubah struktur dari *buckling* menjadi planar seutuhnya [15]. Namun Nazzari dkk menunjukkan bahwa struktur silicene tetap memiliki sifat *buckling* sekalipun dengan adanya *strain* tersebut, namun dengan adanya reduksi pada *buckling* tersebut [16].

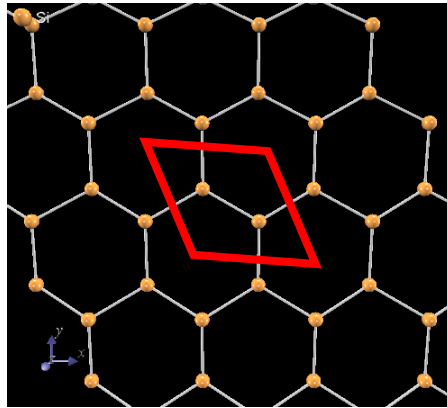
Dalam paper ini akan dibahas tentang kestabilan konfigurasi atom pada silicene menggunakan *freestanding silicene* sebagai model. Metode *First-Principles* menggunakan *Density Functional Theory* digunakan sebagai metode perhitungan. Dari hasil simulasi dapat diketahui bahwa silicene merupakan material yang tidak stabil dalam kondisi *freestanding* serta konfigurasi atom-atomnya dipengaruhi oleh substrat yang digunakan.

## METODE

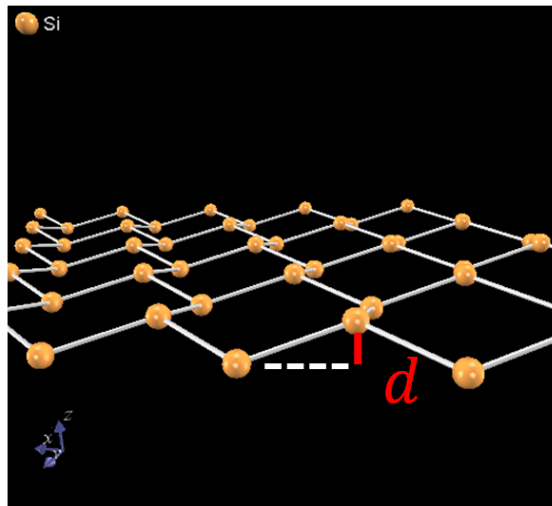
Penelitian ini menggunakan perhitungan numerik dengan prinsip *First-Principles Calculation* (FPC). Perhitungan FPC tersebut menggunakan konsep *Density Functional Theory* (DFT) dan dilakukan menggunakan program PHASE0 [17] - [20]. Pseudopotensial yang digunakan dalam perhitungan menggunakan model yang dikembangkan oleh Troullier dan Martins [21]. *Cut off* yang digunakan pada fungsi gelombang dan rapat muatan masing-masing adalah 40 Rydberg dan 160 Rydberg. Dalam perhitungan ini digunakan *Local Density Approximation* (LDA) digunakan sebagai energi *exchange*. Metode LDA yang digunakan adalah metode yang dikembangkan oleh Perdew dan Wang [22]. Nilai awal dari konstanta kisi dan buckling yang digunakan adalah 3.830 angstrom dan 0.440 angstrom dari acuan referensi [5]. Nilai sumbu vertikal diatur sebesar 20 angstrom untuk mereduksi interaksi antar bidang silicene. Kemudian konstanta kisi divariasikan sebesar 0.001 angstrom dan geometri dari silicene dioptimasi dengan gaya minimum  $10^{-4}$  eV/angstrom serta delta total energi sebesar  $10^{-10}$  eV. Nilai *k-point* yang digunakan dalam proses optimasi adalah  $25 \times 25 \times 125 \times 25 \times 1$ . Sedangkan untuk menggambarkan struktur pita energi digunakan *k-point* sebesar  $10 \times 10 \times 110 \times 10 \times 1$ .

## HASIL

Struktur geometri pada silicene ditunjukkan pada Gambar 1. Tampak bahwa silicene berupa hexagonal dengan unit cell berupa *monolayer* rombohedral. Konstanta kisi " $a$ " dengan total energi minimum yakni pada konstanta kisi 3.810 angstrom (lihat Gambar 3. dan gambar 4).

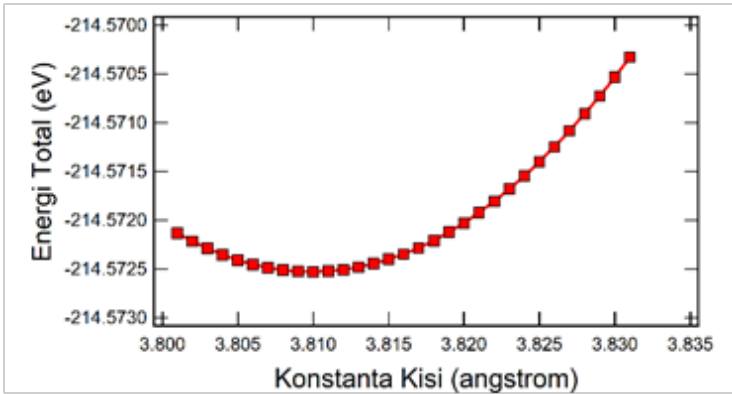


Gambar 1. Konstanta Kisi Silicene

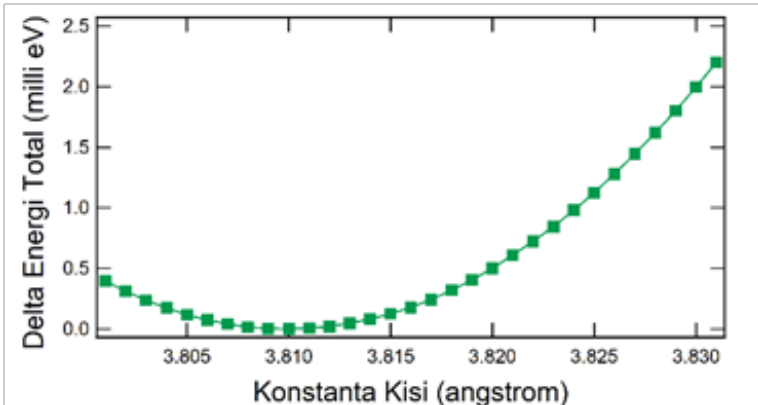


Gambar 2. Buckling pada Silicene.

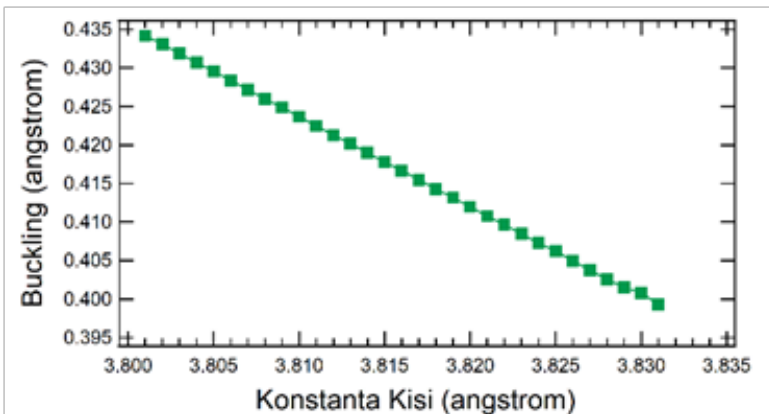
*Buckling "dd"* (Gambar 2) yang diperoleh pada konstanta kisi tersebut adalah 0.424 angstrom (lihat gambar 5). Sedangkan panjang ikatan dari atom-atom silikon pada silicene pada kondisi total energi minimum tersebut adalah 2.240 angstrom (lihat gambar 6). Setelah diperoleh struktur dengan energi minimum tersebut maka digambarkan struktur elektronik dari elektron (lihat gambar 7). Maka ditunjukkan dispersi linear dari energi di titik K pada struktur elektronik silicene tersebut.



Gambar 3. Konstanta Kisi vs Energi Total.

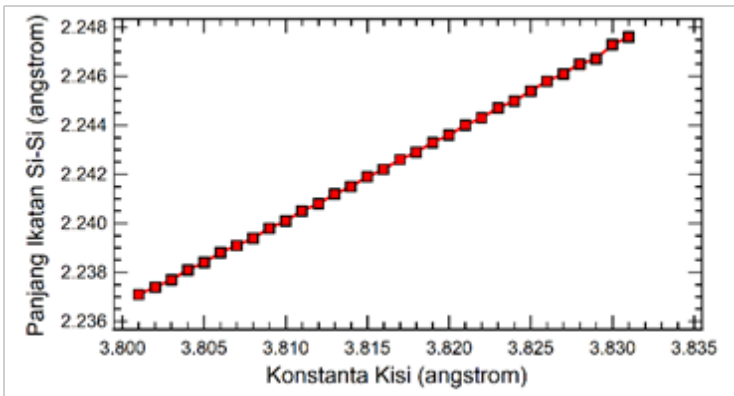


Gambar 4. Konstanta Kisi vs Delta Energi Total.

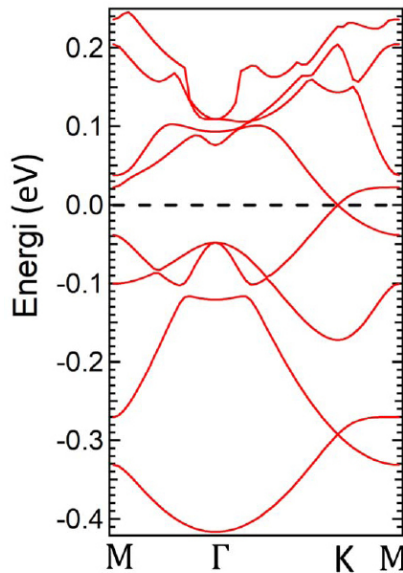


Gambar 5. Konstanta Kisi vs Buckling.





Gambar 6. Konstanta Kisi vs Panjang Ikatan.



Gambar 7. Struktur Elektronik Silicene.

## PEMBAHASAN

Kestabilan struktur geometri dari suatu material dapat dengan mudah diamati dari total energi dari sistem tersebut. Dalam penelitian ini diperoleh bahwa silicene memiliki struktur geometri

yang tidak pasti. Gambar 3 menunjukkan bahwa silicene dalam keadaan freestanding memiliki energi minimum dengan konstanta kisi yakni 3.810 angstrom. Namun hal ini tidak menjamin silicene dapat disintesis dengan konstanta kisi tersebut. Pada Gambar 4 menunjukkan bahwa silicene dengan konstanta kisi 3.800 angstrom sampai 3.830 angstrom memiliki beda energi antara 0.5 hingga 2.5 milli eV. Beda energi tersebut sangat kecil sekali (kurang dari 5 milli eV) yang menandakan sistem tersebut bisa disintesis pada rentang kisi tersebut. Sehingga konstanta kisi pada substrat akan digunakan oleh atom-atom silikon untuk mengkonfigurasi kontanta kisi silicene yang akan dibentuk. Hal ini memberikan kesempatan peneliti untuk mengaplikasikan *strain engineering* dengan memvariasi substrat yang berbentuk hexagonal dengan beragam konstanta kisi. Sehingga diperoleh sifat elektronik yang berbeda, bergantung pada substrat yang digunakan.

Dalam penelitian ini ditunjukkan pula ketika konstanta kisi memanjang maka interaksi ikatan kovalen sigma pada atom-atom silikon menjadi lemah. Bertambah panjang konstanta kisi mengakibatkan bertambah panjang ikatan kovalen sigma silikon dengan silikon. Hal ini kemudian menjadikan ikatan  $\pi\pi$  memiliki peran untuk memberikan kestabilan pada silicene. Hal ini ditandai pula dengan semakin bertambah panjang kisi maka *buckling* akan semakin kecil (lihat gambar 5 dan 6). Demikian pula sebaliknya ketika konstanta kisi memendek maka ikatan kovalen sigma akan sangat dominan dan ikatan  $\pi\pi$  memiliki peran yang tidak begitu signifikan. Demikian juga ketika konstanta kisi menjadi lebih pendek, maka interaksi antara elektron-elektron yang berada pada kulit dalam silikon akan semakin dominan pula. Oleh karena itu ditunjukkan pada gambar 5 dan 6. Hal ini mengakibatkan panjang ikatan kovalen sigma dari atom-atom silikon menjadi lebih pendek dan *buckling* dari silicene menjadi lebih besar.

Dalam publikasi ini ditunjukkan pula struktur elektronik dari silicene dengan menggunakan konstanta kisi pada energi mini-

mum yakni 3.810 angstrom (gambar 7). Tampak dispersi liner (DC) pada titik K pada struktur elektronik tersebut. Hal menunjukkan simulasi telah sesuai dengan beberapa jurnal yang sebelumnya telah membahas silicene secara teoritik [4], [5].

## SIMPULAN

Dalam penelitian ini dapat diambil kesimpulan bahwa silicene bukanlah material yang stabil dan dapat disintesis dalam keadaan *freestanding*. Geometri pada silicene akan sangat bergantung pada substrat yang digunakan. Tidak dapat diketahui pasti nilai konstanta kisi, *buckling* pada silicene tersebut. Hal ini bertolak belakang dengan Graphene yang memiliki konstanta kisi yang nyaris sama dalam segala metode sintesis yakni 2.46 angstrom(1-3). Hal ini menandakan beragam substrat dapat dicoba untuk menumbuhkan silicene dengan beragam panjang konstanta kisi dan buckling. Hal ini dapat merealisasikan *strain engineering* pada material dua dimensi, dimana *strain engineering* masih sulit untuk diaplikasikan pada material pada umumnya.

## DAFTAR PUSTAKA

- [1] Novoselov, K.S.; Geim A.K.; Morozov S.V.; Jiang, D., Zhang, Y.; Dubonos, S.V.; Grigorieva, I.V.; Firsov, A.A. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science* 306, 666-669 [2004].
- [2] Novoselov, K. S.; Geim, A. K.; Morozov, S. V.; Jiang, D.; Katsnelson, M. I.; Grigorieva, I. V.; Dubonos, S. V.; Firsov, A. A. Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene. *Nature* 438, 197-200 [2005].

- [3] Castro Neto, A.H.; Guinea, F.; Peres, N.M.R.; Novoselov, K.S.; & Geim A.K. The Electronic Properties of Graphene, *Rev. Mod.Phys.* 81, 109-162 [2009].
- [4] Takeda, K. & Shiraishi, K. Theoretical possibility of stage corrugation in Si and Ge analogs of graphite. *Phys. Rev. B* 50, 14916–14922 [1994].
- [5] Cahangirov, S.; Topsakal, M.; Aktürk, E.; Şahin, H.; Ciraci, S. Two- and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium. *Phys.Rev. Lett.* 102, 236804 [2009].
- [6] Oughaddou, H.; Enriquez, H.; Tchalala, M. R.; Yildirim, H.; Mayne, A. J.; Bendounan, A.; Dujardin, G.; Ait Ali, M.; Kara, A. Silicene, a Promising New 2D Material. *Prog. Surf. Sci.* 90, 46–83. [2015],
- [7] Kara, A.; Enriquez, H.; Seitsonen, A. P.; Lew Yan Voon, L. C.; Vizzini, S.; Aufray, B.; Oughaddou, H. A Review on Silicene - New Candidate for Electronics. *Surf. Sci. Rep.* 67, 1–18 [2012].
- [8] Lalmi, B.; Oughaddou, H.; Enriquez, H.; Kara, A.; Vizzini, S.; Ealet, B.; Aufray, B. Epitaxial Growth of a Silicene Sheet. *Appl. Phys. Lett.* 97, 223109 [2010].
- [9] Vogt, P.; De Padova, P.; Quaresima, C.; Avila, J.; Frantzeskakis, E.; Asensio, M. C.; Resta, A.; Ealet, B.; Le Lay, G. Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two Dimensional Silicon. *Phys. Rev. Lett.* 108, 155501 [2012].
- [10] Chen, L.; Liu, C.-C.; Feng, B.; He, X.; Cheng, P.; Ding, Z.; Meng, S.; Yao, Y.; Wu, K. Evidence for Dirac Fermions in a Honeycomb Lattice Based on Silicon. *Phys. Rev. Lett.* 109, 056804 [2012].
- [11] Lin, C.-L.; Arafune, R.; Kawahara, K.; Kanno, M.; Tsukahara, N.; Minamitani, E.; Kim, Y.; Kawai, M.; Takagi, N. Substrate

- Induced Symmetry Breaking in Silicene. *Phys. Rev. Lett.* 110, 076801 [2013].
- [12] Wang, Y.-P.; Cheng, H.-P. Absence of a Dirac Cone in Silicene on Ag(111): First-Principles Density Functional Calculations with a Modified Effective Band Structure Technique. *Phys. Rev. B* 87, 245430 [2013].
- [13] Mahatha, S. K.; Moras, P.; Bellini, V.; Sheverdyayeva, P. M.; Struzzi, C.; Petaccia, L.; Carbone, C. Silicene on Ag(111): A Honeycomb Lattice without Dirac Bands. *Phys. Rev. B* 89, 201416 [2014].
- [14] Sadeddine, S.; Enriquez, H.; Bendounan, A.; Kumar Das, P.; Vobornik, I.; Kara, A.; Mayne, A. J.; Sirotti, F.; Dujardin, G.; Oughaddou, H. Compelling Experimental Evidence of a Dirac Cone in the Electronic Structure of a 2D Silicon Layer. *Sci. Rep.* 7, 44400 [2017].
- [15] Stpniak-Dybala, A.; Dyniec, P.; Kopciuszyski, M.; Zdyb, R.; Jałochowski, M.; Krawiec, M. Planar Silicene: A New Silicon Allotrope Epitaxially Grown by Segregation. *Adv. Funct. Mater.* 29, 1906053 [2019].
- [16] Nazzari, D.; Genser, J.; Ritter, V.; Bethge, O.; Bertagnolli, E.; Ramer, G.; Lendl, B; Watanabe, K.; Taniguchi, T.; Rurali, R.; Kolibal, M.; Lugstein, A.; Highly Biaxially Strained Silicene on Au(111). *J. Phys. Chem. C* 125, 9973–9980 [2021]
- [17] Hohenberg, P. & Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev.* 136, B864 (1964).
- [18] Kohn, W. & Sham J. Self Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Phys. Rev.* 140, A1133 (1965).
- [19] Ohno, T.; Yamamoto, T.; Kokubo, T.; Azami, A.; Sakaguchi, Y.; Uda, T.; Yamasaki, T.; Fukata, D.; Koga, J.; First-principles calculations of large scale semiconductor systems on the

earth simulator. SC '07: Proc. 2007 ACM/IEEE Conf. on Supercomputing, 2007, 57.

- [20] Payne, M.C.; Teter, M.P.; Allan, D.C.; Arias T.A.; Joannopoulos J.D. Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradient. *Rev. Mod. Phys.* 64, 1045 (1992).
- [21] Troullier, N. and Martins J.L. Efficient pseudopotentials for plane wave calculations. *Phys. Rev. B* 43, 1993 (1991).
- [22] Perdew J.P., and Wang Y., Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Phys. Rev. B* 45, 13244 (1992).