

# SIFAT MEKANIK H-BN NANOSHEET UNTUK APLIKASI NANO-DIODES DAN NANO-TRANSISTORS

**Jacob F. N. Dethan**

Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Buddhi Dharma  
Jalan Imam Bonjol No. 41, Tangerang, Indonesia  
Email: jacob.dethan@ubd.ac.id

## **Abstrak**

Sifat mekanik dari h-BN nanosheet telah dipelajari menggunakan metode simulasi molecular dynamics. Dalam penelitian ini, potensial interatomic kompleks "Reactive Force Field" digunakan untuk menjelaskan interaksi antara atom boron dan atom nitrogen. Potensial ini dipilih untuk karena hasil penelitian dari peneliti-peneliti sebelumnya memilih untuk menggunakan potensial sederhana seperti potensial Tersoff. Hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa h-BN nanosheet dalam konfigurasi armchair memiliki ketahanan terhadap beban tensile yang lebih baik dibandingkan dengan h-BN nanosheet dengan konfigurasi zigzag. Hal ini dapat digunakan sebagai klarifikasi terhadap hasil kontradiksi yang ada di literatur sejauh ini. Dalam penelitian ini juga ditemukan bahwa ketahanan h-BN nanosheet terhadap beban tensile mengalami penurunan ketika temperatur ditingkatkan dari 200 K ke 500 K. Diharapkan agar hasil penelitian ini digunakan sebagai pertimbangan penting dalam proses perancangan dan fabrikasi nano-diodes dan nano-transistors berbasis h-BN nanosheet.

## **Kata Kunci**

*Simulasi MD, h-BN nanosheet, sifat mekanik*

## **Latar Belakang**

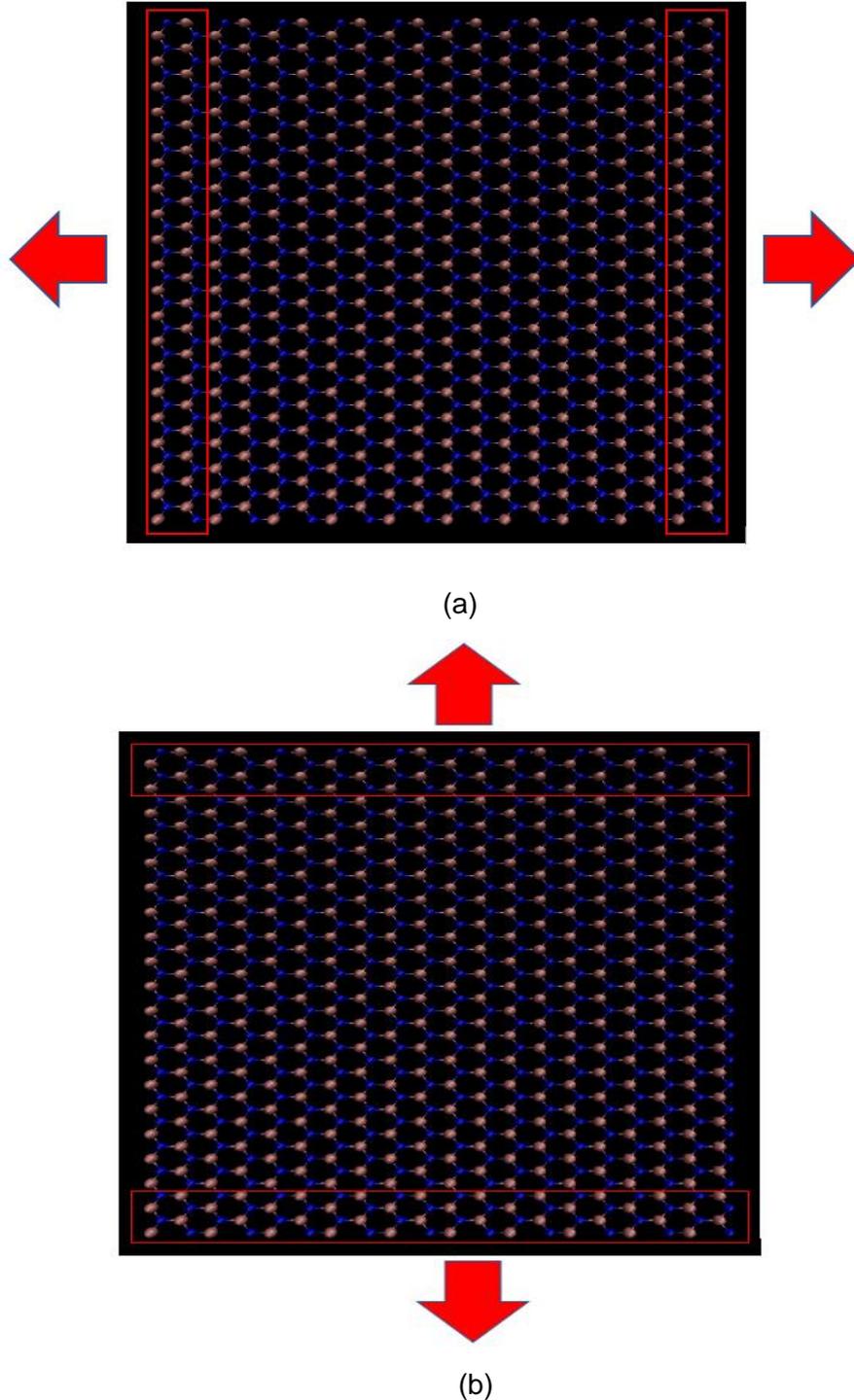
Hexagonal boron nitride (h-BN) nanosheet telah menjadi salah satu opsi yang diteliti dalam berbagai penelitian sebelumnya dan disarankan untuk digunakan sebagai bahan baku pembuatan nano-diodes dan nano-transistors [1, 2]. Untuk perancangan aplikasi nano-diodes dan nano-transistors, diperlukan pemahaman komprehensif mengenai sifat-sifat bahan dari h-BN nanosheet. Salah satu sifat bahan yang penting untuk dipelajari adalah sifat mekaniknya. Mayoritas penelitian sebelumnya telah mempelajari sifat mekanik dari graphene yang kemiripan struktur dengan h-BN nanosheet [3-10]. Tapi, terdapat beberapa penelitian sebelumnya telah mempelajari sifat mekanik dari h-BN nanosheet [11, 12].

Salah satu metode yang paling populer yang dapat digunakan untuk mempelajari sifat mekanik dari material dalam skala nano adalah dengan menggunakan metode simulasi molecular dynamics (MD). Metode ini dipilih dengan pertimbangan akan sulitnya proses eksperimen yang harus dilakukan dalam pengukuran sifat mekanik material dalam skala nanometer. Penggunaan metode simulasi molecular dynamics juga dapat dijadikan acuan valid mengingat tingkat akurasi perhitungan metode simulasi MD yang dapat dibandingkan dengan hasil dari eksperimen dan metode simulasi lainnya.

Pengaruh konfigurasi antara zigzag dan armchair dari h-BN nanosheet telah dipelajari sebelumnya. Zigzag h-BN nanosheet ditemukan memiliki strain energy lebih besar dari armchair h-BN nanosheet [13]. Tapi, hasil ini bertolak belakang dengan hasil yang diperoleh di [14]. Dalam penelitian ini, armchair h-BN nanosheet memiliki resistansi terhadap beban tensile lebih besar dibandingkan zigzag h-BN nanosheet. Untuk itu, kontradiksi ini merupakan salah satu komponen penting yang akan diinvestigasi di dalam penelitian ini.

### Metode Penelitian

Struktur yang disimulasikan dalam penelitian ini adalah h-BN nanosheet dengan dimensi 50 x 50 Å<sup>2</sup>. Reactive force field (ReaxFF) [15] digunakan sebagai interatomic potential yang menjelaskan interaksi antara atom boron dan atom nitrogen. Beban tensile diberikan pada nanosheet seperti Gambar 1 berikut:

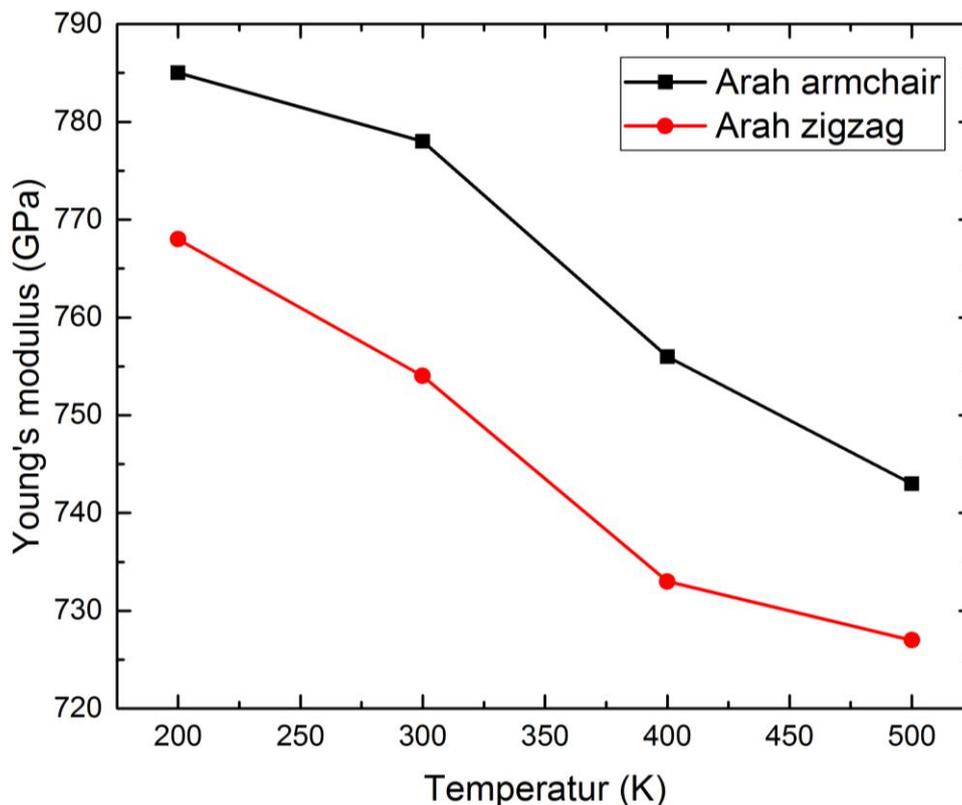


Gambar 1. Struktur h-BN nanosheet yang diberikan beban tensile kearah armchair (a) dan zigzag (b). Atom Boron direpresentasikan dengan warna merah muda dan atom nitrogen dengan warna biru.

Struktur dari h-BN nanosheet pada mulanya setimbang secara termal selama 15 ps pada temperatur 300 K dengan menggunakan time step sebesar 0.2 fs. Kestabilan temperatur dan tekanan dicapai dengan menggunakan Nose-Hoover thermostat dan barostat. kedua ujung dari h-BN nanosheets yang ditandai dengan persegi panjang berwarna merah diberikan beban tensile dengan strain rate sebesar  $0.001 \text{ ps}^{-1}$ .

### Hasil

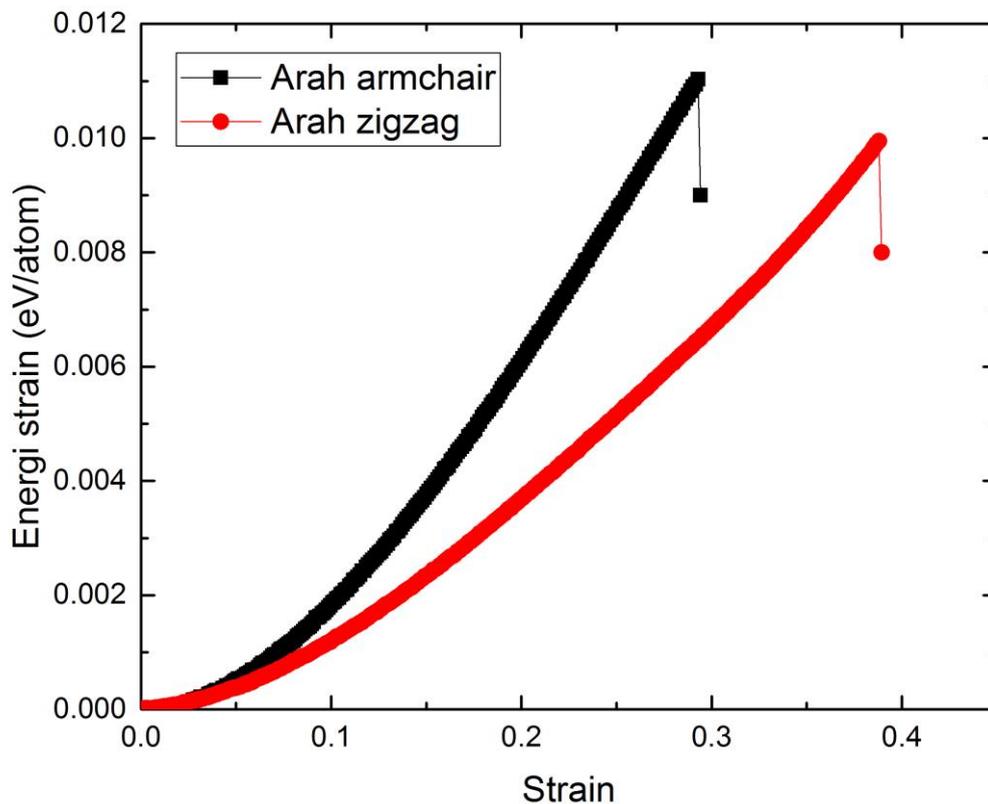
Perhitungan yang diperoleh berdasarkan hasil simulasi MD yang telah dilakukan menunjukkan bahwa h-BN nanosheet lebih kuat ketika diberikan beban tensile dalam arah konfigurasi armchair dibandingkan dengan arah konfigurasi zigzag. Hal ini dapat dilihat melalui Gambar 2 yang menampilkan besaran Young's modulus dari h-BN nanosheet dengan arah beban tensile secara armchair yang memiliki Young's modulus pada temperatur 300 K sebesar 778 GPa dibandingkan dengan 754 GPa yang dimiliki oleh h-BN nanosheet ketika diberikan beban tensile ke arah zigzag pada temperatur yang sama. Nilai Young's modulus yang diperoleh dalam penelitian ini juga sebanding dengan yang diperoleh di dalam penelitian sebelumnya [14] yang memperoleh Young's modulus sebesar 771 GPa untuk armchair h-BN dan 768 GPa untuk zigzag h-BN. Hal ini telah menjadi validasi akan keakuratan metode simulasi yang digunakan dalam penelitian ini.



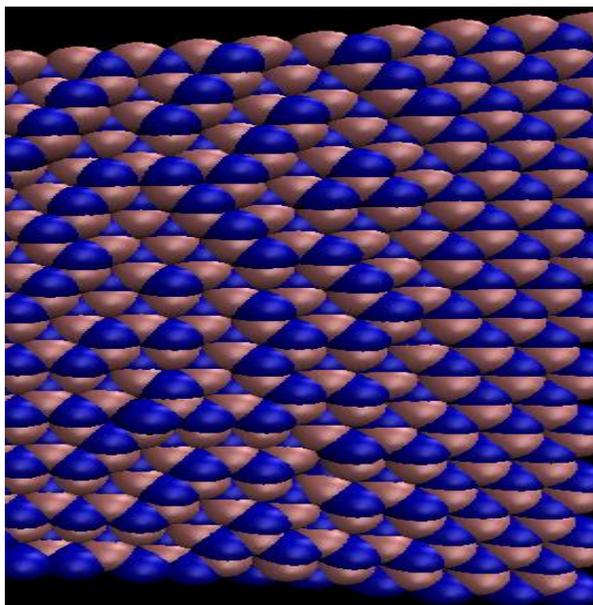
Gambar 2. Young's modulus dari h-BN nanosheet dengan variasi temperatur.

Dampak dari peningkatan temperatur juga terlihat dengan jelas memberikan efek terhadap kekuatan dari h-BN nanosheets yang dapat dilihat dari menurunnya nilai Young's modulus dari h-BN nanosheets secara signifikan ketika temperatur dinaikkan dari 200 K menjadi 500 K. Hal ini dapat dipahami dengan melihat sifat material yang menjadi semakin lentur ketika dipanasi. Lebih kuatnya h-BN nanosheet dengan konfigurasi armchair dibandingkan dengan konfigurasi zigzag juga dapat dilihat melalui hasil plot energi strain seperti yang ditampilkan di Gambar 3.

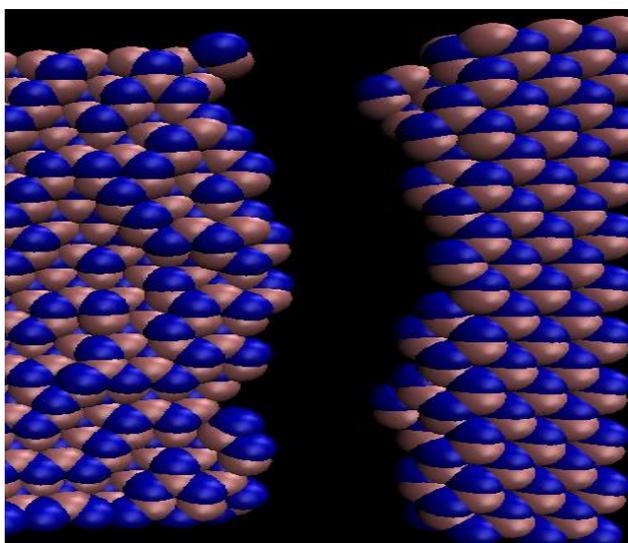
Gambar ini menunjukkan secara jelas bahwa energi yang dibutuhkan untuk melakukan proses deformasi h-BN nanosheet dengan konfigurasi armchair lebih besar dibandingkan dengan konfigurasi zigzag. Selain itu, strain dari zigzag h-BN nanosheet lebih besar dibandingkan armchair h-BN nanosheet seperti yang ditunjukkan di Gambar 3. Hal ini menandakan bahwa zigzag h-BN nanosheet dapat ditarik lebih panjang atau lebih lentur dibandingkan dengan armchair h-BN nanosheet. Bentuk deformasi dari kedua konfigurasi h-BN nanosheet ketika terjadi perpatahan adalah perpatahan rapuh seperti yang ditampilkan di Gambar 4.



Gambar 3. Energi strain dari h-BN nanosheet di temperatur 300 K.



(a)



(b)

Gambar 4. Bentuk h-BN nanosheet ketika proses deformasi terjadi. (a) merupakan kondisi awal sebelum diberikan beban tensile dan (b) merupakan kondisi akhir ketika struktur h-BN nanosheet terpisah menjadi dua bagian sebagai akibat dari beban tensile.

### Kesimpulan

Sifat mekanik dari h-BN nanosheet telah dipelajari dalam penelitian ini dan telah diperoleh bahwa h-BN nanosheet mampu menahan beban tensile dengan lebih besar ketika konfigurasi beban tensile diterapkan ke arah armchair dibandingkan dengan arah zigzag. Baik itu armchair h-BN maupun zigzag h-BN mengalami penurunan ketahanan terhadap beban tensile ketika temperatur dinaikkan dari 200 K sampai 500 K. Bentuk deformasi dari kedua konfigurasi h-BN nanosheets adalah perputahan rapuh. Hasil ini dapat dijadikan klarifikasi terhadap hasil bertentangan yang diperoleh di dalam penelitian-penelitian sebelumnya.

## Ucapan Terima Kasih

Terima Kasih kepada Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Buddhi Dharma sebagai tempat penelitian dilakukan.

## Referensi:

- [1] Nguyen VH, Mazzamuto F, Bournel A, Dollfus P. *Journal of Physics D: Applied Physics* 2012;45: 325104.
- [2] Jeong H, Bang S, Oh HM, Jeong HJ, An S-J, Han GH, et al. *Acs Nano* 2015;9:10032-10038.
- [3] Frank I, Tanenbaum DM, van der Zande AM, McEuen PL. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena* 2007;25:2558-2561.
- [4] Papageorgiou DG, Kinloch IA, Young RJ. *Progress in Materials Science* 2017;90:75-127.
- [5] Scarpa F, Adhikari S, Phani AS. *Nanotechnology* 2009;20:065709.
- [6] Faccio R, Denis PA, Pardo H, Goyenola C, Mombrú AW. *Journal of Physics: Condensed Matter* 2009;21:285304.
- [7] Gao Y, Hao P. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 2009;41: 1561-1566.
- [8] Wang F, Drzal LT, Qin Y, Huang Z. *Journal of Materials Science* 2015;50:1082-1093.
- [9] Zhang Y, Wang C, Cheng Y, Xiang Y. *Carbon* 2011;49:4511-4517.
- [10] Bu H, Chen Y, Zou M, Yi H, Bi K, Ni Z. *Physics Letters A* 2009;373:3359-3362.
- [11] Mortazavi B, Cuniberti G. *RSC Advances* 2014;4:19137-19143.
- [12] Peng Q, Ji W, De S. *Computational Materials Science* 2012;56:11-17.
- [13] Le M.-Q, Umeno Y. *International Journal of Fracture* 2017;205:151-168.
- [14] Rakib T, Mojumder S, Das S, Saha S, Motalab M. *Physica B: Condensed Matter* 2017; 515:67-74.
- [15] Pai SJ, Yeo BC, Han SS. *Physical Chemistry Chemical Physics* 2016;18:1818-1827.