

## Pemodelan fenomena adsorpsi hidrogen pada permukaan kristal silikon (001) dan (111) menggunakan metode dinamika molekuler = Modeling of hydrogen adsorption phenomena on crystal silicon surface (001) dan (111) using molecular dynamics method

Muhammad Bachtiar Yusuf, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20490591&lokasi=lokal>

---

Abstrak

**ABSTRAK**

Hidrogen telah diketahui sebagai faktor penting untuk produk semikonduktor silikon. Silikon sebagai material yang paling melimpah dan layak sebagai semikonduktor membutuhkan kondisi layak untuk didapatkan sifat listrik dan optik yang tepat. Fenomena adsorpsi hidrogen pada silikon telah dipelajari menggunakan simulasi komputasi dan eksperimen oleh para peneliti. Simulasi dinamika molekuler menggunakan potensial Lennard-Jones telah dilakukan untuk mendemonstrasikan kemampuan adsorpsi hidrogen permukaan silikon (001) dan (111) dengan variasi temperatur sebesar 233 K, 253 K, 273 K, dan 293 K yang diterapkan pada tekanan 1, 2, 5, 10, dan 15 atm. Berdasarkan hasil simulasi, didapatkan jumlah hidrogen yang diadsorpsi oleh permukaan silikon meningkat apabila jumlah panas dalam sistem berkurang. Tanpa meninjau aspek entropi, permukaan kristal Si (001) memiliki kemampuan adsorpsi lebih tinggi dibandingkan Si (111) disebabkan oleh energi bebas permukaan yang lebih tinggi. Hal tersebut jelas terlihat pada tekanan 15 atm dibandingkan variasi tekanan lainnya. Kapasitas adsorpsi paling tinggi dimiliki oleh Si (001) 233 K pada 15 atm dengan jumlah konsentrasi hidrogen teradsorpsi 0,166430075% wt., dan paling rendah dimiliki oleh Si (111) 293K pada 1 atm senilai 0,004759865% wt.

---

**ABSTRACT**

Hydrogen was known as important factor for silicon semiconductor product. Silicon as the most abundant and feasible material for semiconductor needs precisely proper condition to have the exact optical and electrical properties. The hydrogen adsorption on silicon phenomena had been studied through computational simulations and experiment by researchers. Molecular dynamics simulation using a Lennard-Jones potential was conducted to demonstrate the hydrogen adsorption capability of silicon surface (001) and (111) with various temperatur applied, 233 K, 253 K, 273 K, and 293 K at pressure 1, 2, 5, 10, dan 15 atm. The amount of hydrogen adsorbed by silicon surfaces were higher as the amount heat of the system decreases. Without considering entropy, Si (001) had higher adsorption capability due to its higher energy surface than Si (111). It had shown where the pressure was at 15 atm, the difference seemed way more obvious than other pressure condition. Si (001) on 233 K at 15 atm had the highest adsorption capacity with 0,17% wt., of hydrogen. The lowest amount of hydrogen capacity was achieved by Si (111) on 293 K at 1 atm with 0,0048% wt.