

PEMODELAN DAN SIMULASI AMORPHOUS SILICON QUANTUM DOT (a-SiQD) MENGUNAKAN METODE EXTENDED HÜCKEL THEORY

SETIANTO[†], SAHRUL HIDAYAT, LIU KIN MEN, AHMAD ROFIQ

*Departemen Fisika,
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Padjadjaran
Jl. Raya Bandung-Sumedang Km 21, Jatinangor 45363*

Abstrak. Quantum Dot adalah bahan nanokristal semikonduktor yang sangat kecil sehingga menyebabkan energi gapnya merupakan fungsi dari ukuran partikel, semakin kecil ukuran partikel menghasilkan energi gap yang semakin besar. Salah satu jenis bahan Quantum Dot adalah amorphous Silicon Quantum Dot (a-SiQD) yang memiliki potensi besar untuk bahan teknologi optoelektronik dan telah dikembangkan secara eksperimen nanostruktur a-SiQD untuk mempelajari efek quantum confinement dan karakteristik emisi cahaya. Pada penelitian ini, dibuat model kluster a-SiQD dengan melakukan teknik translasi untuk memperbesar ukuran dan membuat kluster berbentuk bulat dengan menghapus beberapa atom silikon terluar dan menambahkan atom hidrogen. Untuk mendapatkan karakteristik elektronik dan optik kluster a-SiQD, dilakukan perhitungan energi gap menggunakan metode Extended Hückel Theory (EHT). Hasilnya, ketika variasi dot size kluster a-SiQD mengalami penurunan dari 2,1 nm ke 0,85 nm energi gap mengalami peningkatan dari 2,29 – 4,53 eV. Tidak hanya itu, bentuk bulat dan penambahan atom hidrogen juga mempengaruhi besar energi gap kluster a-SiQD. Sehingga rekayasa energi gap kluster a-SiQD dapat ditingkatkan dengan mengatur dot size, bentuk dan jumlah atom hidrogen.

Kata kunci : *Quantum Dot, a-SiQD, Extended Hückel Theory*

Abstract. *Quantum Dot is a very small semiconductor nanocrystal material which causes the energy gap is a function of the size of the particle (dot size), and the energy gap of a-SiQD increases as the dot size decreases. This physical phenomenon is influenced by the quantum confinement effect. One of Quantum Dot material is Amorphous Quantum Dot Silicon (a-SiQD) which has a great potential for optoelectronic technology, and a good quality of a-SiQD nanostructures has grown experimentally to study the quantum confinement effect as well as the characteristics of light emission. In this study, we made some a-SiQD cluster models by doing translational technique to enlarge the cluster size and made round-shaped clusters by removing some of the outermost of silicon atoms and then adding some hydrogen atoms. To obtain the electronic and optical characteristics of a-SiQD clusters, energy gap calculation using the Extended Hückel Theory (EHT) method was performed. As a result, when dot size was decreased from 2.1 to 0.85 nm, the energy gap of a-SiQD clusters increased from 2.29 to 4.53 eV. Moreover, the round-shaped clusters and the process of addition of hydrogen atoms also affects the energy gap of the a-SiQD clusters. Thus, the engineering energy gap of a-SiQD clusters can be raised by adjusting the dot size, the shape of the cluster and the number of hydrogen atoms addition.*

Keywords: Quantum Dot, a-SiQD, Extended Hückel Theory Pendahuluan

1. Pendahuluan

Quantum Dot (QD) adalah bahan nanokristal semikonduktor yang sangat kecil dan memiliki ukuran diameter kurang dari 10 nanometer. Karena ukuran QD yang sangat kecil menyebabkan karakteristik QD berbeda dibandingkan ukuran yang lebih besar. Semakin kecil ukuran diameter QD akan menghasilkan energi gap yang semakin besar, sedangkan semakin besar ukuran diameter QD menghasilkan energi gap yang semakin kecil. Maka dari itu, karakteristik elektronik energi gap QD merupakan fungsi dari ukuran atau radius diameter bahan (*dot size*) [1,2]. Beberapa hasil sintesis

[†] Email : setianto@phys.unpad.ac.id

QD jika dikenai cahaya akan memancarkan sinar dengan panjang gelombang tertentu, dan emisi panjang gelombang ini dapat diatur dengan mengubah ukuran diameter QD [3,4]. Emisi panjang gelombang biru dipancarkan oleh QD dengan diameter sekitar 2 nm, panjang gelombang hijau dipancarkan QD dengan diameter sekitar 3 nm, panjang gelombang kuning oleh QD dengan diameter sekitar 4 nm, dan panjang gelombang merah oleh QD berdiameter 5 nm [5]. Dimensi QD berada diantara ukuran molekul dan ukuran *bulk* [6]. Istilah QD disebut sebagai kluster, karena ukuran QD terlalu kecil untuk memiliki sifat fungsi gelombang elektronik ukuran *bulk* meskipun QD menunjukkan struktur kristal hampir mirip dengan *bulk*. Karena QD termasuk orbital molekul kluster dan energinya mengalami kuantisasi, menghasilkan level energi yang diskrit dan digambarkan sebagai pita HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*) – LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*) seperti pita energi pada bahan *bulk* yang digambarkan sebagai *band structure* [2]. Salah satu bahan semikonduktor QD adalah *Silicon Quantum Dot* (SiQD). Ada dua jenis silikon yaitu *crystalline silicon* (c-Si) dan *amorphous silicon* (a-Si). Namun a-Si memiliki dua keuntungan dibandingkan dengan c-Si. Yakni efisiensi *luminescence* a-Si lebih baik dibanding c-Si karena struktur yang acak. Dan energi gap a-Si (1,6 eV) lebih besar dibandingkan c-Si (1,12 eV). Akibatnya a-Si dapat digunakan sebagai bahan yang baik untuk pemancar cahaya panjang gelombang pendek (*short-wavelength luminescence*) [8,9]. Dan pada penelitian ini digunakan SiQD bentuk amorf atau a-SiQD, karena dengan bentuk amorf maka komposisi molekulnya tidak teratur menyebabkan energi gap akan bertambah besar [8]. perkembangan penelitian a-SiQD, ukuran diameter a-SiQD (*dot size*) yang dibuat hasil sintesis berkisar antara 1,4 – 2,4 nm [8,9]. Ukuran diameter a-SiQD hasil eksperimen belum mencapai kurang dari 1 nm karena memang pada teknik sintesis a-SiQD yang sulit. Namun dalam penelitian ini melakukan perhitungan teoritik komputasi untuk mempelajari karakteristik energi gap pada model kluster a-SiQD. Model kluster a-SiQD yang dibuat bahkan dengan ukuran kurang dari 1 nm sehingga dapat digunakan untuk memprediksi karakteristik elektronik a-SiQD. Perhitungan teoritik komputasi ini menggunakan pendekatan Linear Combination of Atomic Orbitals (LCAO) dan menggunakan metode Extended Hückel Theory (EHT) yang memperhitungkan semua elektron valensi dan juga tidak mengabaikan interaksi antara orbital atom (*integral overlap*) [10]. Manfaat yang ingin dicapai dari penelitian ini adalah memodelkan kluster a-SiQD dan mengitung energi gap dengan metode EHT sehingga mengetahui karakteristik pengaruh *dot size* dan bentuk terhadap energi gap yang dapat digunakan sebagai referensi untuk sintesis a-SiQD pada rekayasa energi gap dan dapat digunakan dalam berbagai aplikasi teknologi elektronik dan fotonik.

2. Eksperimen (Pemodelan a-SiQD)

Silikon adalah bahan yang dominan dalam teknologi elektronika skala mikro dan nano. Akan tetapi karena Si memiliki struktur celah energi yang *indirect* menyebabkan Si tidak aplikatif sebagai bahan teknologi piranti fotonik atau optoelektronik seperti LED [17]. Perkembangan teknologi terkini dari bahan Si telah mencapai pada teknologi skala nano yaitu fabrikasi struktur bahan nol dimensi yang dikenal sebagai *silicon nanocrystal* atau *silicon nanoparticle*. Material yang sangat kecil ini sering disebut sebagai titik atau *dot*, atau *silicon quantum dot* dapat disingkat SiQD [7]. Karena telah diketahui bahwa karakteristik QD berubah berdasarkan ukuran diameternya, hal ini juga berlaku untuk SiQD. Peristiwa menurunnya energi gap a-SiQD seiring dengan penurunan ukuran a-SiQD diakibatkan oleh peristiwa efek pengurungan ukuran kuantum (*quantum size confinement effect*). Partikel – partikel elektron dan hole akan semakin terkurung seiring dengan menurunnya ukuran a-SiQD, sehingga menyebabkan peningkatan energi gap pada bahan dan level – level keadaan energinya akan mengalami kuantisasi sehingga menghasilkan level energi yang diskrit. Pendekatan analitik untuk menjelaskan peristiwa perubahan energi gap seiring dengan semakin kecilnya ukuran

bahan akibat *quantum size confinement effect* pada semikonduktor nanopartikel adalah dengan persamaan *Effective Mass Approximation* (EMA) [1,2].

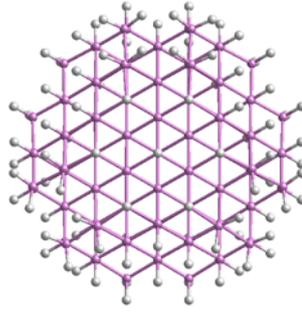
$$E_g(R) = E_{bulk} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2R^2} \left(\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right) - \frac{1,8e^2}{\epsilon R} \quad (2.1)$$

dengan: E_g = energi gap QD
 E_{bulk} = energi gap semikonduktor *bulk*
 R = radius QD
 m_e^* = massa efektif elektron
 m_h^* = massa efektif hole
 e = muatan elektron
 \hbar = konstanta Planck
 ϵ = konstanta dielektrik

Suku pertama pada persamaan 2.1 di atas adalah energi gap dari material semikonduktor untuk ukuran *bulk* dan merupakan karakteristik tertentu dari bahan. Suku tambahan kedua menggambarkan penambahan energi gap karena efek pengurungan kuantum dan memiliki hubungan $\frac{1}{R^2}$ pada energi gap semikonduktor nanopartikel (E_g QD), hubungan $\frac{1}{R^2}$ inilah yang mengakibatkan bertambah besarnya energi gap a-SiQD ketika ukuran diameternya semakin kecil karena radius R partikel berhubungan dengan ukuran diameter bahan. Tambahan suku ketiga pada persamaan 2.1 menunjukkan energi interaksi Coulomb dari pasangan elektron dan hole dan memiliki hubungan $\frac{1}{R}$ pada energi gap. Sebenarnya hubungan $\frac{1}{R}$ ini bertolak belakang berkaitan dengan efek pengurungan kuantum pada suku kedua, semakin kecil ukuran diameter bahan maka suku ini akan menurunkan energi gap a-SiQD. Interaksi Coulomb pada bahan semakin menurun, memiliki harga yang kecil dan seringkali diabaikan karena harga konstanta dielektrik yang tinggi, sehingga yang mendominasi perubahan energi gap bahan adalah dari suku kedua akibat pengurungan kuantum. Konstanta 1,8 didapatkan dari interaksi Coulomb dan mengabaikan atom yang jaraknya jauh. Sehingga energi gap a-SiQD akan selalu meningkat dengan penurunan diameter bahan [1,2].

Pembuatan model klaster a-SiQD akan dilakukan beberapa tahap yang akan dijelaskan prosesnya sebagai berikut: i). Mencari referensi koordinat atomik kristal silikon yang berbentuk *diamond cubic* pada *American Mineralogist Crystal Structure Database* (AMCSD) dan mengunduh file dengan ekstensi cif (salah satu jenis file berisi struktur koordinat kristal atom). Penelitian ini menggunakan kristal *diamond* silikon dengan dengan nilai parameter kisi $a = b = c = 5,4455 \times 10^{-10}$ m, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ dengan 8 atom silikon setiap *unit cell* [23]. Kemudian file berekstensi cif tersebut dibuka dengan aplikasi GDIS (aplikasi grafis struktur kimia) yang digunakan untuk memodifikasi struktur klaster a-SiQD. (ii) Memodifikasi struktur klaster silikon yang ada yaitu menambahkan jumlah molekul pada klaster sesuai *axial adding* atau dilakukan duplikasi dengan teknik translasi untuk menghasilkan sel satuan yang identik dengan operasi dengan persamaan $T = n_1a + n_2b + n_3c$ dimana n_1, n_2 dan n_3 adalah bilangan bulat dan a, b dan c adalah vektor satuan dalam arah tiga dimensi, sehingga terbentuk klaster dengan ukuran yang lebih besar. Kemudian membuat klaster tersebut menjadi *supercell* agar hasil penjumlahan molekul menjadi satu *supercell*.(iii) Setelah menjadi satu klaster berukuran besar, kemudian menghapus beberapa atom pada posisi tertentu sehingga terbentuk klaster berbentuk bulat. Dan juga diperhatikan proses penghapusan jumlah atom agar mempertimbangkan jumlah atom sehingga terbentuk material *Silicon Quantum Dot* yaitu dengan kisaran diameter klaster 1 – 10 nm. (iv) Silikon mempunyai empat elektron valensi terluar, maka terdapat atom – atom silikon terluar pada klaster yang telah dibuat tidak berikatan empat, akan tetapi

ada beberapa atom terluar silikon yang hanya berikatan satu, dua atau tiga saja. Menurut teori pada keadaan tersebut tidaklah stabil secara ikatan sehingga mempengaruhi karakteristik kluster tersebut. Maka dari itu dilakukan penambahan atom hidrogen pada beberapa atom silikon terluar agar semua atom silikon pada kluster yang dibuat semuanya mempunyai ikatan empat, proses tersebut sering disebut hidrogenisasi.



Gambar 1. Kluster a-SiQD dengan Penambahan Atom Hidrogen

Hasil yang didapatkan pada penelitian ini adalah berupa model kluster a-SiQD dengan bentuk kluster a-SiQD bulat dan divisualisasikan menggunakan aplikasi ArgusLab. Hasil perhitungan energi gap untuk masing – masing model kluster a-SiQD berbeda – beda dan merupakan fungsi dari *dot size* kluster a-SiQD. Didapatkan hasil penelitian model kluster a-SiQD dengan ukuran diameter 0,85 nm, 1,1 nm, 1,5 nm, 1,74 nm dan 2,1 nm.

2.1 Perhitungan dan Simulasi a-SiQD

Dalam teori orbital molekul struktur elektronik molekul ditunjukkan oleh orbital molekul fungsi gelombang yang digambarkan sebagai kombinasi LCAO. Representasi persamaannya adalah:

$$\psi = \sum_i c_i \varphi_i \quad i = 1,2,3 \dots n \quad (2.2)$$

Dengan ψ adalah fungsi eigen yaitu fungsi gelombangnya dan merupakan kombinasi linear dari fungsi – fungsi basis orbital atom, φ_i adalah fungsi basis orbital atom dan c_i adalah koefisien fungsi basis orbital atom. Dan jika mengkombinasi linear semua atom dengan pendekatan LCAO maka:

$$\sum_i \hat{H} c_i \varphi_i(x) = \sum_i E c_i \varphi_i(x) \quad (2.3)$$

Dimana E adalah:

$$E = \frac{\int \varphi \hat{H} \varphi dv}{\int \varphi \varphi dv} = \frac{\sum_{i,j} c_i c_j H_{ij}}{\sum_{i,j} c_i c_j S_{ij}} \quad (2.4)$$

Pada persamaan (2.4) komponen yang berada di atas merupakan elemen matriks \hat{H}_{ij} dan komponen di bawahnya merupakan matriks *overlap* S_{ij} sehingga dengan demikian energi tersebut harus diminimalisasi terhadap semua koefisien c_i dengan cara :

$$\frac{\delta E}{\delta c_i} = 0; \quad i = 1,2,3 \dots n \quad (2.5)$$

Maka akan diperoleh:

$$\sum_{i=1}^n (H_{ij} - E S_{ij}) c_i = 0 \quad i, j = 1,2,3 \dots n \quad (2.6)$$

Fungsi basis set STO-6G pada persamaan 2.1 digunakan untuk menghitung matriks *overlap* S_{ij} . Untuk elemen matriks H_{ij} diaproksimasi menggunakan persamaan:

$$H_{ij} = 0,5 K (H_{ii} + H_{jj}) S_{ij} \quad (2.7)$$

Berdasarkan hasil perhitungan teoritik bahwa harga konstanta K adalah 1,75 karena menghasilkan koordint atom yang presisi untuk berbagai atom. Dan untuk elemen matriks H_{ii} dan H_{jj} dipilih sebagai VSIE orbital atom [24,25]. Setelah mendapatkan komponen matriks S_{ij} , H_{ii} dan H_{jj} maka selanjutnya dapat menentukan matriks H_{ij} sesuai persamaan (2.7). Perhitungan energi gap kluster a-SiQD dihitung dengan menggunakan aplikasi ArgusLab, namun tidak semua file *crystal coordinate* dikenali oleh ArgusLab termasuk juga cif. Maka dari itu model kluster a-SiQD yang telah dibuat tersebut yang semula berekstensi cif dirubah menjadi file berekstensi xyz, yaitu jenis ekstensi yang dikenali oleh ArgusLab dengan bantuan aplikasi GDIS. File xyz ini juga jenis ekstensi berisi koordinat atomik kristal di titik x, y dan z yang kemudian dijalankan oleh aplikasi ArgusLab dalam perhitungan energi gap menggunakan EHT. Sedangkan perhitungan energi orbital molekul a-SiQD dengan metode EHT terdapat beberapa langkah, seperti memilih koordinat atom kluster a-SiQD, memilih *Basis Set* untuk perhitungan orbital molekul, perhitungan elemen matriks *overlap* yang digunakan selanjutnya untuk melakukan perhitungan elemen matriks Hamiltonian, terakhir adalah nilai eigen dan vektor eigen matriks orbital molekul dengan melakukan teknik diagonalisasi ortogonal. Proses *data fitting* atau validasi data antara data energi hasil perhitungan menggunakan metode EHT dengan hasil eksperimen yang telah dikerjakan. Energi gap E untuk pengurangan 3D a-SiQD sesuai dengan *Effective Mass Approximation* (EMA) dapat dinyatakan dengan persamaan:

$$E (eV) = E_{bulk} + \frac{c}{d^2} \quad (2.8)$$

dimana E_{bulk} adalah energi a-Si, d adalah pengaruh *dot size* dan c parameter *confinement*. Gambar 2 adalah hasil eksperimen energi gap yang terdiri dari 5 sampel data. Data pada gambar 2 paling sesuai dicocokkan dengan persamaan:

$$E \text{ (eV)} = 1,56 + \frac{2,40}{d^2} \quad (2.9)$$

Nilai pencocokkan E_{bulk} sebesar 1,56 sesuai dengan nilai literatur *bulk* a-Si yaitu berkisar 1,5 - 1,6 eV. Selain itu, Dibuat model kluster a-SiQD yang ukurannya lebih kecil dari kelima data hasil eksperimen, hasil eksperimen dibuat pada rentang 1,4 – 2,4 nm [8,9], sedangkan pada penelitian ini model kluster a-SiQD dapat dibuat dengan diameter kurang dari 1 nm. Hal ini kemudian dapat dijadikan untuk memprediksi kurva energi gap a-SiQD dan sekaligus membantu menjelaskan karakteristik energi gap pada a-SiQD.

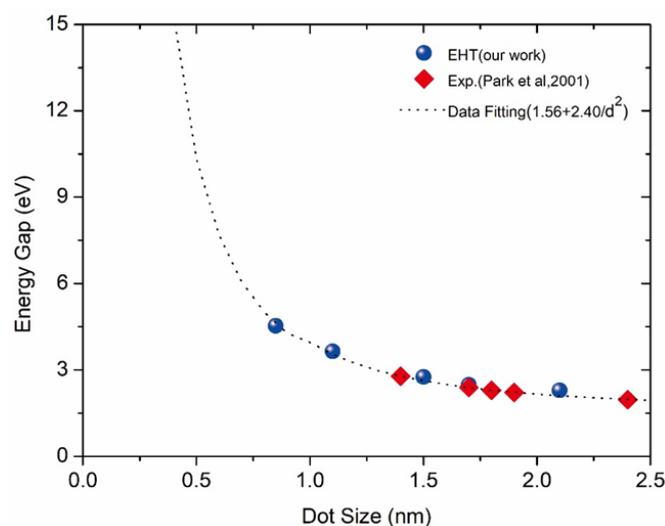
3. Hasil dan Pembahasan

Variasi diameter model kluster a-SiQD pada penelitian ini berukuran dari diameter 0,85 nm – 2,1 nm. Hasil perhitungan berdasarkan variasi *dot size* tersebut menunjukkan perubahan energi gap yang semakin kecil seiring semakin besarnya ukuran kluster a-SiQD.

Tabel 1. Hasil Energi Gap Kluster a-SiQD

<i>Dot Size</i> (nm)	E_{HOMO} (eV)	E_{LUMO} (eV)	ΔE_{HL} (eV)
0,85	9,094819	4,563491	4,531328
1,1	8,673197	5,021797	3,651400
1,5	7,526593	4,767178	2,759415
1,74	7,324990	4,849932	2,475058
2,1	7,046257	4,759146	2,287111

Tabel 1 di atas menunjukkan bahwa nilai energi gap HOMO – LUMO ditentukan oleh besar kecilnya diameter model kluster. Misalkan pada ukuran diameter 0,85 nm, menghasilkan energi gap sebesar 4,53 eV dan jika ukuran kluster semakin besar misalkan pada 2,1 nm maka energi gap akan menurun yaitu sebesar 2,29 eV.



Gambar 2. Energi Gap Kluster a-SiQD

Dari gambar 2 di atas bentuk bola berwarna biru merupakan energi gap kluster a-SiQD dari diameter 0,85 – 2,1 nm dengan perhitungan menggunakan EHT, bentuk *diamond* berwarna merah merupakan energi gap a-SiQD hasil eksperimen yang didapatkan dari referensi dengan rentang diameter dari 1,4 – 2,4 nm dan garis titik – titik di atas adalah *data fitting* sesuai dengan persamaan (3.12). Hasil perhitungan energi gap dengan EHT nilainya tidak persis sama dengan hasil eksperimen, akan tetapi *trend data* menunjukkan hasil yang sama. Hal ini karena pembuatan model ukuran kluster a-SiQD tidak sama dengan ukuran hasil sintesis a-SiQD secara eksperimen, namun pada model ukuran 1,74 nm hampir mendekati a-SiQD hasil eksperimen yaitu 1,7 nm dan menghasilkan energi gap yang tidak jauh berbeda. Dan secara keseluruhan, hasil perhitungan energi gap EHT dibandingkan energi gap eksperimen mendekati hasil yang sama dan sesuai dengan teori pengurangan kuantum.

Selain itu, dengan penurunan ukuran diameter bahan mengakibatkan rapat keadaan (*density of state*) QD berubah menjadi lebih terkuantisasi sehingga energi gap bergeser ke level energi yang lebih tinggi. Akibatnya, terjadi perubahan karakteristik optik pada QD yaitu peningkatan absorbansi bahan pada daerah panjang gelombang yang lebih kecil. Dari hasil eksperimen, perubahan ukuran diameter pada bahan a-SiQD menyebabkan transisi dari absorpsi panjang gelombang merah, kuning menjadi biru dan disebut “*blue shift*” dengan mengatur energi gap dari 2,0 – 2,76 eV [8,9]. Dari gambar 2, bahwa hasil pergeseran energi gap dari bentuk a-Si *bulk* ke bentuk a-SiQD menunjukkan meningkatnya pergeseran energi gap untuk semakin kecilnya ukuran kluster. Sehingga hasil penelitian ini dengan validasi eksperimen dapat diprediksi bahwa *photoluminescence spectra* panjang gelombang hijau oleh a-SiQD dihasilkan dari model kluster a-SiQD dengan diameter 2,1 nm dengan energi gap sebesar 2,29 eV dan mengalami pergeseran energi sebesar 0,73 eV dari bentuk a-Si *bulk*, panjang gelombang biru dihasilkan oleh model kluster a-SiQD diameter 1,5 nm dengan energi gap 2,76 eV dan pergeseran energi sebesar 1,2 eV. Namun, pada penelitian ini juga dihasilkan model kluster a-SiQD untuk ukuran diameter yang lebih kecil yaitu 1,1 nm, dan 0,85 nm dengan energi gap yang semakin besar sehingga selanjutnya dapat digunakan sebagai referensi untuk memprediksi karakteristik elektronik dan karakteristik optik bahan a-SiQD.

4. Simpulan

Telah diperoleh lima model kluster a-SiQD berbentuk bulat dengan ukuran masing – masing *dot size* kluster adalah 0,85 nm, 1,1 nm, 1,5 nm, 1,74 nm dan 2,1 nm. Energi gap kluster a-SiQD untuk beragam variasi *dot size* tersebut dihitung dengan EHT dan hasilnya berturut – turut adalah 4,53 eV, 3,65 eV, 2,76 eV, 2,48 eV dan 2,29 eV. Hasilnya, semakin kecilnya ukuran *dot size* kluster a-SiQD tersebut menghasilkan energi gap orbital molekul yang semakin besar. Tidak hanya *dot size* yang berpengaruh terhadap energi gap, bentuk kluster a-SiQD juga berpengaruh terhadap perubahan energi gap. Model kluster harus dibuat secara teliti dengan memperhatikan bentuk bulat kluster, karena tidak semua bentuk kluster a-SiQD akan menghasilkan energi gap yang sesuai dengan teori. Selain itu, penambahan atom hidrogen terhadap atom silikon terluar yang tidak berikatan oktet juga mempengaruhi energi gap kluster a-SiQD. Ketika terdapat atom silikon terluar yang tidak berikatan stabil dan tidak ditambahkan atom hidrogen, maka energi gap akan berubah.

Daftar Pustaka

1. Brus, Louis. 1984. *Electron-electron and electron-hole interactions in small semiconductor crystallites: the size dependence of the lowest excited electronic state*. Journal Chem. Phys. Vol. 80. pp.4403–4409.
2. Brus, Louis. 1986. *Electronic wave functions in semiconductor clusters: experiment and theory*. Journal Phys. Chem. Vol. 90. No. 12. pp.2555–2560.

3. Arthur, Ekpekpo and Lucky, Akpojivi. 2013. *Synthesis and Characterization of Cds and Cdse Quantum Dots by UV-VIS Spectroscopy*. Jeteas. Vol. 4. No. 2. pp.273-280.
4. Acharya, Aurobinda., Sahu, Sarmistha., Balamurgan, Selvaraju., Sankar, Gouri. 2017. *Effect of Doping on Nano Cadmium-Selenide (CdSe) Assessment Through UV-VIS Spectroscopy*.
5. Hideki, Ooba. 2006. *Synthesis of Unique High Quality Fluorescence Quantum Dots for the Biochemical Measurements*. Aist Today. Vol. 6. No. 6. pp.26-27.
6. Bera, D., Qian, L., Tseng, T., Holloway, P. 2010. *Quantum Dots and Their Multimodal Applications*. A Review Materials. Vol. 3. pp.2260-2345.
7. Murphy, Catherine., Jeffery, Coffey. 2002. *Quantum Dots: A Primer*. Applied Spectrosc. Vol. 56. pp.16A-27A.
8. Park, N., Kim, T., Park, T. 2001. *Band Gap Engineering of amorphous silicon quantum dots for LightEmitting Diodes*. Applied Physics Letters. Vol. 78. No. 17. pp.2575-2577.
9. Park, Nae Man., Choi, Chel Jong., Seong, Tae Yeon., Park, Seong Ju. 2001. *Quantum Confinement in Amorphous Silicon Quantum Dots Embedded in Silicon Nitride*. Physical Review Letter. Vol. 86. No. 7. pp.1355-1357.
10. Ramachandran., Deepa, G., Namboori, K. 2008. *Computational Chemistry and Molecular Modeling: Principles and Applications*. Heidelberg: Springer.
11. Xia, Y., Yang, P., Sun, Y., Mayers, B., Gates, B., Yin, Y., Kim, F., Yan, H. 2003. *One Dimensional Nanostructures: Synthesis Characterization and Application*. Advances materials. Vol. 5. pp.353.
12. Rao, R., Thomas, J., Kulkarni U. 2007. *Nanocrystal: Synthesis, Properties and Applications*. Springer. Vol. 8. pp.182.
13. Charles, P., Frank, Poole., Owens, J. 2003. *Introduction to Nanotechnology*. USA: Wiley-Interscience Publication.
14. Mai, Phuong., Reinhard, Gerhard., Suraud, Eric. 2014. *An Introduction to Cluster Science*. Singapore: Markono Print Media.
15. Elliott, D. 2010. Acta Cryst B. Vol. 66. pp-271-279.
16. Kittel, Charles. 2005. *Introduction to Solid State Physics 8th ed*. USA: John Wiley & Sons.
17. Koga, J., Nishio, K., Yamaguchi, T., Yonezawa, F. 2001. *Tight-Binding Electronic State Calculations of Silicon Nanostructures with local Disorders: Origin of the F Band Luminescence From Porous Silicon*. Journal of the Physical Society of Japan. Vol. 70. No. 8. pp.2478-2484.
18. Batu, Ghosh and Naoto, Shirahata. 2014. *Colloidal silicon quantum dots: synthesis and luminescence tuning from the near-UV to the near-IR range*. Sci. Tech. Adv. Matter. Vol.15. pp-14.
19. Siregar, Rustam E. 2009. *Mekanika Kuantum Molekul*. Bandung: Jurusan Fisika FMIPA UNPAD.
20. Hoffmann, R. 1963. *An Extended Hückel Theory. I. Hydrocarbons*. Journal Chem. Phys. Vol. 39. No. 6. pp.1397-1412.
21. Fleming and Rohl. 2005. Software GDIS, (<http://www.gdis.seul.org>)
22. Thompson, Mark. Software ArgusLab 4.0. Planaria Software LLC. Seattle, USA. (<http://www.arguslab.com>)
23. Wyckoff, R. 1963. *Silicon Crystal Structure I*. New York: Interscience Publishers.
24. John, P and Peterson, Kirk. 2006. *Quantum Chemistry: 3rd ed*. UK: Elsevier Academic Press.
25. Tjia, M dan Sutjahja. 2012. *Orbital Kuantum: Pengantar Teori dan Contoh Aplikasinya*. Bandung: Karya Putra Darwati.