

INTISARI

PERANAN VAKANSI ATOM PADA RAPAT KEADAAN (DOS) h-BN MONOLAYER MENGGUNAKAN METODE RAMBATAN WAKTU IKATAN KUAT TROTTER-SUZUKI

Oleh

CAECARICO IMAS WASISTO NUGROHO

19/451977/PPA/05915

Pada penelitian kali ini mengkaji tentang h-BN monolayer dengan *defect* berupa vakansi menggunakan *Time-Propagation Method* (TPM) Trotter – Suzuki dengan sistem yang tersusun atas banyak sekali atom. Metode ini menyederhanakan hamiltonian matriks dari persamaan Schrodinger gayut waktu (TDSE). *Defect* yang dikaji difokuskan pada vakansi boron dan nitrogen dengan konsentrasi tertentu. Sistem dengan vakansi atom boron V_B menghasilkan rapat keadaan terlokalisasi baru pada daerah pita valensi maksimum (VBM) dan menurunkan singularitas van Hove (vHs) di -1.15 dan $5.64 E/t$. Hal tersebut juga terjadi pada sistem dengan vakansi nitrogen V_N , namun rapat keadaan terlokalisasi baru muncul pada daerah pita konduksi minimum (CBM). Keadaan terlokalisasi baru akibat dari V_B dan V_N seiring bertambahnya konsentrasi vakansi akan mengalami kenaikan, sedangkan vHs mengalami penurunan. Secara simultan apabila konsentrasi $V_B > V_N$, maka rapat keadaan terlokalisasi V_B lebih besar dibandingkan V_N . Seiring bertambah besar keadaan terlokalisasi V_B maka keadaan terlokalisasi V_N semakin kecil, namun tidak mempengaruhi keadaan *vHs*.

Kata kunci: h-BN, DOS, Trotter-Suzuki, time-propagation method, vacancies.

ABSTRACT

THE ROLE OF ATOMIC VACANCY ON DENSITY OF STATES (DOS) h-BN MONOLAYER USING TROTTER-SUZUKI TIGHT-BINDING TIME PROPAGATION METHOD

By

CAECARICO IMAS WASISTO NUGROHO

19/451977/PPA/05915

In this study, we examine monolayer with defects in the form of vacancy using time propagation method (TPM) Trotter-Suzuki with system composed of large number of atoms. This method simplifies Hamiltonian matrix of Time Dependent Schoringer Equation (TDSE). The defect studied were focused on vacancies of boron and nitrogen with certain concentrations. System with boron atomic vacancies V_B resulted a new localized density of states in the maximum valence band (VBM) region and decreased van Hove singularity (vHs) at -1.15 and $5.64 E/t$. This also occurs in system with nitrogen vacancies V_N , but the localized density of states only appears in the minimum conduction band (CBM) region. The new localized states as a result of V_B and V_N with increasing vacancy concentration will increase, while vHs decrease. Simultaneously if the concentration of $V_B > V_N$, localized density of states V_B is greater than V_N gets smaller, but does not affect the state of vHs.

Key words: h-BN, DOS, Trotter-Suzuki, time-propagation method, vacancies.