

INTISARI

EFEK KETIDAKTERATURAN TERHADAP SIFAT ELEKTRONIK GRAPHENE *MONOLAYER*: KAJIAN NUMERIK METODE RAMBATAN WAKTU TROTTER-SUZUKI

Oleh

THOMAS AQUINO ARIASOCA

17/418545/PPA/05329

Telah dilakukan kajian komputasi untuk perhitungan rapat keadaan sistem graphene *monolayer* dengan dua macam ketidakteraturan, yakni vakansi pada atom karbon dan impuritas atom hidrogen, dengan menggunakan metode rambatan waktu Trotter-Suzuki untuk mencari penyelesaian dari persamaan Schrödinger gayut waktu sistem yang kemudian digunakan untuk perhitungan rapat keadaan. Penelitian ini terfokus pada kasus gabungan vakansi dan impuritas pada satu sistem secara sistematis. Untuk tingkat konsentrasi yang cukup tinggi, pada tingkat energi rendah di sekitar energi Fermi, *band gap* terbuka ketika konsentrasi vakansi berkurang dan keadaan terlokalisir tetap berada pada energi Fermi. Selain itu, muncul puncak-puncak pada $E/t = -2.972, -2.704, -2.435, -2.033, -0.959$, dan $E/t = 0.978, 1.975, 2.416, 2.684, 2.991$ yang berkaitan dengan grup karbon yang terisolasi. Untuk konsentrasi yang lebih tinggi pada kasus graphane (graphene yang terhidrogenasi 90% yang mengalami vakansi 10%), muncul dua puncak tambahan pada $E/t \approx \pm 2$ yang berhubungan dengan interaksi hidrogen-karbon. Pada konsentrasi rendah, hasil penelitian menunjukkan gambaran konsisten dari pembukaan *band gap* dan kemunculan keadaan terlokalisir dengan penelitian sebelumnya.

Kata Kunci: graphene, rapat keadaan, metode rambatan waktu, impuritas, vakansi, persamaan Schrödinger gayut waktu

ABSTRACT

EFFECT OF DISORDER ON ELECTRONIC PROPERTIES OF GRAPHENE MONOLAYER: NUMERICAL STUDIES OF TROTTER-SUZUKI TIME PROPAGATION METHOD

By

THOMAS AQUINO ARIASOCA

17/418545/PPA/05329

A computational study has been carried out to calculate the DOS of monolayer graphene with two types of disorders, which are vacancy on carbon atoms and hydrogen impurities, using Trotter-Suzuki time propagation method to calculate the solution of time-dependent Schrödinger equation of the system, which then used for the DOS calculation. This study is focused on the case whereby the vacancy and hydrogen adatom impurities are mixed into one disordered system systematically. For a considerable high concentration of disorder, at low energy close to Fermi level, the band gap is opened as the vacancy concentration is reduced, while the localized state remain stay at the Fermi level. In addition, the additional peaks occur at $E/t = -2.972, -2.704, -2.435, -2.033, -0.959$, and $E/t = 0.978, 1.975, 2.416, 2.684, 2.991$ which are related to isolated carbon group. For higher concentration of disorder (graphene with 90% hydrogenation and 10% vacancy) that correspond to the case of graphane, appears two additional peaks at $E/t \approx \pm 2$ that related to the hydrogen-carbon interaction. As for low concentration of disorder, the result gives a consistent picture of band gap opening and the occurrence of localized state with the previous calculation.

Key words: graphene, density of states, time propagation method, impurity, vacancy, time-dependent Schrödinger equation