

INTISARI

Kajian kestabilan mono- dan divacancy pada h-BN: First-principles Calculations

Oleh

Wardah Amalia

17/418546/PPA/05330

Telah dilakukan analisis kestabilan mono- dan *divacancy* beserta pengaruhnya terhadap geometri dan struktur elektronik material h-BN. Metode penelitian yang digunakan adalah metode DFT dengan basis *plane-wave* dan menggunakan pseudopotensial. Hasil analisis kestabilan yang berdasarkan pada perhitungan energi formasi *vacancy* menunjukkan bahwa V_B dan V_{BN} berturut-turut merupakan konfigurasi mono- dan *divacancy* yang paling stabil untuk sistem h-BN. Pada *monovacancy*, geometri optimisasi V_B dan V_N tidak berubah secara signifikan jika dibandingkan dengan keadaan awalnya, hanya terjadi relaksasi *outward* (V_B) dan relaksasi *inward* (V_N). Untuk kasus *divacancy*, terjadi perubahan geometri yang cukup signifikan. Konfigurasi V_{NN} membentuk konfigurasi mirip hati dengan 2 pentagon, dan V_{BN} membentuk konfigurasi 5–8–5. Terjadi distorsi *out-of-plane* pada konfigurasi V_{NN} dan V_{BB} .

Lepasnya atom Boron yang membentuk V_B dan atom Boron–Nitrogen yang membentuk V_{BN} membentuk *defect-state* pada masing-masing struktur pita energi. Dua *defect-state* yang muncul akibat V_B terletak di dekat pita valensi maksimum, membentuk *vacancy* tipe–P. Sedangkan V_{BN} membentuk dua buah *defect-state* yang tidak terdegenerasi dan terletak diantara pita valensi maksimum dan pita konduksi minimum. Konfigurasi V_B dan V_{BN} secara berturut-turut memiliki simetri D_{3h} dan C_{2v} .

Kata-kata kunci : h-BN, vacancy, energi formasi, struktur elektronik.

ABSTRACT

The study of mono- and divacancy Stability in h-BN: First-principles Calculations

By

Wardah Amalia

17/418546/PPA/05330

The study of mono- and divacancy stability and its effect to geometry and electronic structure of h-BN have been carried out. The method used in this study is DFT method, using plane wave basis and pseudopotential. The results of stability analysis, based on the calculation of formation energies, show that V_B and V_{BN} are the most stable configuration of mono- and divacancies in h-BN, respectively. In monovacancy, geometry of V_B and V_N are not significantly change compared to its initial condition, just have an inward- and outward relaxation. As for divacancy case, the geometries of vacancies are significantly change. V_{NN} form a heart-like configuration, having two pentagons, and V_{BN} form 5–8–5 configuration. There is out-of-plane distortion in V_{NN} and V_{BB} configuration.

The missing of Boron atom (V_B) and Boron–Nitrogen atom (V_{BN}) form defect-states in its band structure. Two defect states in V_B are near the maximum valence band, forming P-type vacancy. As in V_{BN} , it also form two non-degenerate defect states, lie between maximum valence and minimum conduction band. V_B and V_{BN} are classified into D_{3h} and C_{2v} symmetry group, respectively.

Keywords : h-BN, vacancy, formation energy, electronic structure.