

## INTISARI

### Efek Vibrasi Fonon Terhadap Konsentrasi *Vacancy* Pada Intan: Kajian Komputasi Menggunakan *Density Functional Theory*

Oleh

Zohan Syah Fatomi

19/448681/PPA/05764

Telah berhasil dilakukan kajian komputasi terhadap konsentrasi *vacancy* pada sistem *vacancy* intan. Investigasi dilakukan dengan menggunakan pendekatan *Density Functional Theory* (DFT) dengan kerangka perhitungan *generalized gradient approximation* (GGA). Sistem *vacancy* disimulasikan dengan pemodelan super sel 64 dan 216 atom dengan absensi sebuah atom. Efek vibrasi disimulasikan dengan menggunakan pendekatan osilator harmonik. Spektrum *phonon-density of states* P-DOS dibangkitkan dengan menggunakan pendekatan fungsi Gaussian. Hasil kalkulasi menunjukkan bahwa energi formasi sistem *vacancy* intan adalah berkisar pada 6,75 eV. Sedangkan perolehan konsentrasi *vacancy* intan di titik lebur (4100 K) berkisar pada  $C_0 = 2,12 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . Namun ketika efek vibrasi dilibatkan terjadi peningkatan  $10^6 \times$  yaitu sekitar  $C_0^s = 5,03 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . Peningkatan yang signifikan tersebut diduga akibat perilaku *softening* pada sistem *vacancy* intan.

*Kata-kata kunci : Intan, Energi Formasi, Phonon-DOS, Konsentrasi Vacancy*

## ABSTRACT

### Phonon Vibrational Effect on Vacancy Concentration of Diamond: Computational Studies Using Density Functional Theory

By

Zohan Syah Fatomi

19/448681/PPA/05764

The computational studies of vacancy concentration in diamond are successfully carried out. The investigation is performed using the Density Functional Theory (DFT) and calculated in the generalized gradient approximation (GGA). The vacancy system is constructed using a supercell model consisting of 64- and 216- atoms with the absence of an atom. The vibrational effect is simulated using the harmonic oscillator approach. The phonon-density of states are generated through the Gaussian functional approach. The result estimated by the vacancy energy formation is to be 6,75 eV. The calculation of vacancy concentration at the melting point (4100 K) estimated that there is significantly increasing ( $10^6 \times$ ) due to vibrational effect from  $C_0 = 2,12 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  to  $C_0^s = 5,03 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . It is expected that the significant increase is due to the softening in the vacancy system.

*Keywords : Diamond, Formation Energies, Phonon-DOS, Vacancy Concentration*