

INTISARI

OPTIMASI GEOMETRI SISTEM INTAN DENGAN *DOPING* NITROGEN : KOMPUTASI BERBASIS DFT (*DENSITY* *FUNCTIONAL THEORY*)

Oleh

HANA PRATIWI KADARISMAN

13/347647/PA/15345

Telah dilakukan penelitian terkait optimasi geometri sistem intan dengan *doping* nitrogen menggunakan metode DFT (*Density Functional Theory*). Penelitian ini menggunakan *supercell* (super sel) 64 atom karbon (C) yang dikonstruksi dari sel satuan 8 atom C. Perlakuan untuk mendapatkan sistem *defective crystal* dilakukan dengan substitusi 1 atom karbon (C) dengan 1 atom nitrogen (N) di daerah pusat super sel, sehingga diperoleh sistem *defective crystal* $C_{63}N_1$. Setiap atom di dalam super sel akan dilakukan optimasi dengan mengizinkan atom - atom tersebut untuk relaksasi sedemikian rupa sehingga gaya - gaya yang bekerja pada atom lebih kecil dari 5×10^{-3} eV/Å. Variasi perijinan relaksasi atom - atom dilakukan dengan 3 variasi yakni yang pertama relaksasi untuk seluruh atom dalam sistem intan, kedua relaksasi atom nitrogen dan 4 karbon tetangga pertamanya, dan yang ketiga adalah relaksasi atom nitrogen dengan atom - atom karbon tetangga pertama hingga keduanya. Kemudian akan dilakukan perhitungan energi formasi untuk masing - masing variasi guna mengetahui kestabilan *defect* tersebut di dalam sistem. Didapatkan hasil optimasi sistem *defective crystal* $C_{63}N_1$ konvergen pada kalkulasi dengan *k-point* 4. Variasi kedua, yakni pada perijinan relaksasi atom nitrogen hingga tetangga kedua konvergen terhadap hasil kalkulasi perijinan seluruh atom pada sistem sehingga kalkulasi dengan variasi kedua dapat dikatakan bisa mewakili keseluruhan sistem.

Kata-kata kunci : super sel, *n-doped diamond*, energi formasi, *density functional theory*

ABSTRACT

GEOMETRY OPTIMIZATION OF NITROGEN-DOPED DIAMOND : DENSITY-FUNCTIONAL-THEORY-BASED CALCULATION

By

HANA PRATIWI KADARISMAN

13/347647/PA/15345

The geometry optimization of nitrogen-doped diamond is observed with Density Functional Theory based calculation. It used diamond as a supercell consisting of 64 carbon (C) atoms constructed from a unit cell consisting of 8 carbon atoms. A substitution of a carbon atom with a nitrogen atom have done to get the defective crystal structure of diamond $C_{63}N_1$. Every atom in the system will be optimized by allowing each atoms to relax until all of forces worked on it is less then 5×10^{-3} eV/Å. There are 3 variatons of relaxation, firstly is permission for all atoms in system, second is permission for nitrogen atom and first near neighbors (4 atoms C), and the third is permission for nitrogen atom, 4 atoms carbon as the first nearest neighbors and the 12 atoms carbon as second near neighbors. Formation energy for each variation is calculated to get the stability of this defective system. We get result that the optimization of defective crystal system in diamond $C_{63}N_1$ is convergen when we used k-point 4 for computational process. We also get the variation relaxation of nitrogen until second near neighbor is convergen to the variation permission of all atoms, so we proposed that the variation permission until second near neighbors atom from nitrogen could represent all of atoms in the defective crystal $C_{63}N_1$ system.

Keywords : *supercell, n-doped diamond, formation energy, density functional theory*