

## INTISARI

# KAJIAN STRUKTUR PITA ELEKTRONIK GRAPHENE DAN GRAPHANE MENGGUNAKAN MODEL IKATAN KUAT REALISTIK DENGAN KETAKTERATURAN

Oleh

MUHAMMAD QOSIM

10/300684/PA/13330

Dua model matriks hasil modifikasi model ikatan kuat untuk mendekati struktur pita elektronik graphene dan graphane dengan banyak atom beserta beberapa macam ketakteraturannya telah berhasil disusun. Setiap model menghasilkan relasi dispersi energi dan rapat keadaan dengan beberapa perbedaan hasil di antara kedua model. Ketakteraturan potensial on-site  $v_r$  pada *model total* membuat celah pita selebar 0,3 s.d. 0,5 eV, tidak terjadi pada *model diagonal* graphene. Parameter hopping  $t_r$  yang dibuat acak dan didistribusikan secara merata pada semua unit cell tidak menggeser titik Dirac dari aras Fermi, namun mengubah lebar rentang energi pita  $\pi$ . Variasi konsentrasi pengotor hidrogen menciptakan celah pita dari 0,15 eV untuk konsentrasi 25% sampai dengan 2 eV untuk graphene murni pada *model total*, sedang pada *model diagonal* tidak ditemukan celah kecuali pada konsentrasi mendekati 100% disertai munculnya keadaan terlokalisasi (*mid gap states*) pada graphane tak murni.

*Kata-kata kunci : graphene, graphane, model ikatan kuat, dispersi energi, rapat keadaan, celah pita, keadaan terlokalisasi*

## ABSTRACT

### GRAPHENE AND GRAPHANE ELECTRONIC BAND STRUCTURES STUDY THROUGH REALISTIC TIGHT BINDING MODEL WITH DISORDER

By

MUHAMMAD QOSIM

10/300684/PA/13330

Two matrix models as a result of tight binding model modification to approach electronic band structure of graphene and graphane with its disorder has been constructed. Each model produces energy dispersion relation and density of states with several differences between them. On-site potential disorder  $v_r$  in *total model* creates 0,3 to 0,5 eV band gap, did not happened in *diagonal model* of graphene. Randomized hopping parameter  $t_r$ , distributed equally to all sites did not shift Dirac point from Fermi level, but it changes the width of  $\pi$  band energy ranges. Variations of hydrogen impurity concentration create band gap from 0,15 eV for 25% of hydrogen concentration to 2 eV for pure graphane *total model*, whereas in the *diagonal model*, there's no gap ever found except for graphane with concentration near 100% and *mid gap states* for impured graphane.

*Keywords : graphene, graphane, tight binding model, numerical method, energy dispersion, density of states, band gap, mid gap states*