

## INTISARI

### **INTERAKSI STRONSIUM (Sr) DENGAN SiC BERSTRUKTUR HONEYCOMB: KOMPUTASI BERBASIS KUANTUM**

Oleh

TRISNA DIA

13/353072/PA/15711

Dengan menggunakan prinsip *density functional theory* atau teori kerapatan fungsional, telah dilakukan perhitungan energi formasi terhadap *silicon carbide* (SiC) dua dimensi (2D-SiC). Diawali dengan melakukan optimasi terhadap unit sel SiC yang terdiri dari dua atom berupa Si dan C, yang selanjutnya dilakukan perbesaran sebanyak empat kali ke arah sumbu  $x$  dan ke arah sumbu  $y$  dari sistem unit sel SiC, sehingga terbentuk sistem  $4 \times 4 \times 1$ . Untuk memperoleh kestabilan pada sistem 2D-SiC, maka sistem diberikan perlakuan berupa *defect* terhadap sistem. *Defect* yang diberikan berupa atom Sr (Stronsium) dengan pemberian *defect* dilakukan dengan 3 variasi, diantaranya, penambahan (*interstitial*) atom Sr (yang bertindak sebagai *defect*) tepat pada pusat heksagonal sistem (*hollow-site*), substitusi atom Sr pada salah satu atom Si, dan yang terakhir substitusi atom Sr pada salah satu atom C. Dengan menggunakan potensial semu berupa GGAPBE, dapat dilakukan perhitungan serta perbandingan energi formasi dengan variasi nilai *cut-off* fungsi gelombang sebesar 15 Ryd, 25 Ryd, dan 40 Ryd. Setelah perhitungan energi formasi, diperoleh bahwa sistem 2D-SiC menunjukkan kondisi yang stabil adalah ketika diberikan *interstitial* Sr pada pusat heksagonal dengan energi formasi sebesar 0.51 eV dengan nilai energi *cut off* sebesar 40Ryd. Selain itu, dilakukan pula kalkulasi *band structure* terhadap 2D-SiC. Sehingga diperoleh energi gap dari 2D-SiC murni yaitu *direct* pada  $K - point$  sebesar 2.30 eV.

**Kata-kata kunci :** 2D-SiC, DFT, strontium, *formation energy*.

## ABSTRACT

# INTERACTION OF STRONTIUM (Sr) ON SiC HAVING HONEYCOMB STRUCTURE: QUANTUM BASED COMPUTATION

By

TRISNA DIA

13/353072/PA/15711

Using the principle of density functional theory, we have calculated the formation energy of two dimensional silicon carbide 2D-SiC. Based on optimization SiC unit cell and enlarged 4 X 4 X 1 of the SiC unit cell system, we determine 2D-SiC systems have planar structures. To obtain stability in the 2D-SiC system, it is given a defect treatment. Defect given an atom Sr (Strontium) which are done by 3 variations, among others, interstitial of Sr atoms (acting as defect) right at the center of the hexagonal system (hollow-site), substitution of Sr atoms on Si, and the last substitution Sr atom on C. For those 2D-SiC systems with defect, we calculated formation energies and electronic-band structures of the systems. It is found that the 2D-SiC system shows stable condition when it is given interstitial Sr at hexagonal center with formation energy of 0.51 eV at K-point is 40 Ryd. The band gaps calculated within density functional theory using generalized gradient approximation (GGA). In addition, a calculation of band structure to 2D-SiC is obtained. The resulting pure energy gap of 2D-SiC is direct at K-point for 2.30 eV.

**Keywords :** *2D-SiC, DFT, strontium, formation energy.*