

**STUDI TEORETIS PENGARUH UNSUR NONLOGAM SEBAGAI DOPAN  
TERHADAP SIFAT ELEKTRONIK MATERIAL 2D TcS<sub>2</sub> DENGAN  
METODE *DENSITY FUNCTIONAL THEORY***

Widya

20/466500/PPA/06066

**INTISARI**

Studi teoretis tentang pengaruh doping substitusi atom nonlogam terhadap struktur murni material dua dimensi TcS<sub>2</sub> menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada program Quantum Espresso telah berhasil dilakukan. Proses substitusi dilakukan di dua situs yaitu di situs S dan situs Tc. Kehadiran dopan tersebut dalam kerangka utama menyebabkan terjadi distorsi sehingga mengubah panjang ikatan antara atom Tc-S pada material murni. Hal ini sangat dipengaruhi oleh jari-jari atom dan tingkat elektronegatif dari masing-masing dopan. Perubahan panjang ikatan pada situs S tidak lebih dari 4 % dibandingkan kondisi awal, sedangkan untuk situs Tc terjadi perubahan hingga 29 % dari panjang ikatan material murninya. Berdasarkan hasil perhitungan nilai energi pembentukan, ketika atom C, N dan O disubstitusi di situs S menghasilkan nilai energi negatif, yang artinya sistem memiliki kestabilan termodinamika yang baik dan sistem memiliki probabilitas yang tinggi untuk dibentuk. Sedangkan doping di Tc menghasilkan nilai energi pembentukan yang cukup tinggi, hal ini dikarenakan penggantian atom Tc dengan atom nonlogam dimungkinkan lebih sulit mengingat beberapa sifat antara dopan nonlogam dan Tc yang sangat berbeda. Hasil perhitungan *total density of states* (TDOS) dan *partial density of states* (PDOS) menunjukkan telah terjadi pergeseran pita konduksi dan valensi, sehingga nilai *valence band maximum* (VBM) dan *conduction band maximum* (CBM) mengalami perubahan. Nilai celah pita sistem doping TcS<sub>2</sub> didapatkan mengalami penurunan dari 1,25 eV hingga yang terkecil 0,90 eV. Kondisi VBM dan CBM yang mengalami pergeseran dapat dianalisis untuk menentukan jenis doping substitusi yang terjadi pada sistem yang dibentuk.

**Kata kunci:** dopan atom nonlogam, material dua dimensi, TcS<sub>2</sub>, metode DFT

## **THEORETICAL STUDY OF THE INFLUENCE OF NONMETAL DOPANTS ON THE ELECTRONIC PROPERTIES OF TcS<sub>2</sub> 2D MATERIAL BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHOD**

Widya

20/466500/PPA/06066

### **ABSTRACT**

Theoretical studies on the effect of nonmetal atomic substitution doping on the pure structure of two-dimensional TcS<sub>2</sub> materials using the Density Functional Theory (DFT) method in the Quantum Espresso program have been successfully carried out.. The substitution process was carried out at two sites, namely at the S site and the Tc site. The presence of these dopants in the main frame causes distortion so that it changes the bond length between the Tc-S atoms in the pure material. This is greatly influenced by the atomic radius and electronegative level of each dopant. The change in bond length at the S site was not more than 4 % compared to the initial conditions, while for the Tc site there was a change of up to 29 % of the bond length of the pure material. Based on the calculation results of formation energy values, when C, N and O atoms are substituted at the S site, they produce negative energy values, which means the system has good thermodynamic stability and the system has a high probability of being formed. While doping in Tc produces a fairly high value of formation energy, this is because the replacement of Tc atoms with non-metallic atoms may be more difficult considering some of the properties between non-metallic and Tc dopant are very different. The calculation results of total density of states (TDOS) and partial density of states (PDOS) show that there has been a shift in the conduction and valence bands, so that the values of the valence band maximum (VBM) and conduction band maximum (CBM) have changed. The band gap value of the TcS<sub>2</sub> doping system was found to have decrease from 1.25 eV to the smallest 0.90 eV. The conditions of VBM and CBM that have shifted can be analyzed to determine the type of substitution doping that occurs in the system formed.

**Keywords:** nonmetal atomic dopants, two-dimensional materials, TcS<sub>2</sub>, DFT method