



**PENGARUH INTERSTISIAL HIDROGEN PADA SISTEM MONOVACANCY MATERIAL INTAN:  
KOMPUTASI BERBASIS DENSITY  
FUNCTIONAL THEORY**

Nurul Fajariah, Sholihun, S.Si, M.Si, Ph.D.Sc. dan Dr.Sc. Ari Dwi Nugraheni, S.Si., M.Si.

Universitas Gadjah Mada, 2023 | Diunduh dari <http://etd.repository.ugm.ac.id/>

**PENGARUH INTERSTISIAL HIDROGEN PADA SISTEM *MONOVACANCY*  
MATERIAL INTAN: KOMPUTASI BERBASIS *DENSITY FUNCTIONAL THEORY***

Oleh

Nurul Fajariah

22/501070/PPA/06378

Kajian komputasi menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) telah berhasil dilakukan untuk mengetahui pengaruh penambahan atom hidrogen (H-interstisial) pada material intan dengan *defect* MVD (*monovacancy in diamond*). Pada penelitian ini dimodelkan MVD menggunakan supersel yang mengandung 215 atom karbon dan menambahkan H-interstisial ( $n$ H, dengan  $n = 1, 2, 3,$  dan  $4$ ) dengan konfigurasi sistem  ${}_1$ H-V,  ${}_2$ H-V,  ${}_3$ H-V, dan  ${}_4$ H-V. Pengaruh H-interstitial diketahui dengan menghitung energi formasi, energi absorpsi, dan struktur elektronik dari semua sistem. Dari hasil yang diperoleh ditunjukkan bahwa sistem yang paling mudah dibentuk dan memiliki interaksi C-H yang paling kuat adalah sistem  ${}_4$ H-V, karena memiliki energi formasi dan energi absorpsi terendah yaitu berturut-turut sebesar  $-3,94$  eV dan  $-2,52$  eV. Pada pita struktur sistem  ${}_1$ H-V,  ${}_2$ H-V, dan  ${}_3$ H-V muncul *state* baru di sekitar energi Fermi yang mengakibatkan sifat material intan dari yang semula material semikonduktor berubah menjadi material konduktor. Sebaliknya,  ${}_4$ H-V menunjukkan struktur pita yang serupa seperti intan murni, yaitu sebesar  $3,90$  eV.

**Kata kunci:** MVD, H-interstisial, DFT, energi formasi, dan struktur elektronik



**PENGARUH INTERSTITIAL HIDROGEN PADA SISTEM MONOVACANCY MATERIAL INTAN:  
KOMPUTASI BERBASIS DENSITY  
FUNCTIONAL THEORY**

Nurul Fajariah, Sholihun, S.Si, M.Si, Ph.D.Sc. dan Dr.Sc. Ari Dwi Nugraheni, S.Si., M.Si.

Universitas Gadjah Mada, 2023 | Diunduh dari <http://etd.repository.ugm.ac.id/>

***THE EFFECT OF INTERSTITIAL HYDROGEN ON MONOVACANCY OF DIAMOND  
SYSTEM: DENSITY FUNCTIONAL THEORY-BASED COMPUTATION***

By

*Nurul Fajariah*

22/501070/PPA/06378

*Computational studies using the Density Functional Theory (DFT) method have been successfully conducted to determine the effect of the addition of hydrogen atoms (H-interstitial) on monovacancy of diamond (MVD) material. In this study, MVD defects were modeled using supercells containing 215 carbon atoms and adding H-interstitials ( $nH$ , with  $n = 1, 2, 3,$  and  $4$ ) with system configurations  $1H-V$ ,  $2H-V$ ,  $3H-V$ , and  $4H-V$ . The effect of H-interstitial is known by calculating the formation energy, absorption energy, and electronic structure all of systems. From the results obtained, it is shown that the most easily formed system and has the strongest C-H interaction is the  $4H-V$  system, because it has the lowest formation energy and absorption energy of  $-3.94$  eV and  $-2.52$  eV, respectively. In the band structure of the  $1H-V$ ,  $2H-V$ , and  $3H-V$  systems, new states appear around the Fermi energy, changing the properties of diamond materials from semiconductors to conductors. In contrast,  $4H-V$  shows a similar band structure as pure diamond, which is  $3.90$  eV.*

**Keywords:** *MVD, H-interstitial, DFT, formation energy, and electronic structure.*