

## INTI SARI

### **Kajian Stabilitas *Defective* g-GaN menggunakan *Density-Functional Theory* (DFT)**

Oleh

Malika Fadllyana  
22/501807/PPA/06402

Graphene-like GaN (g-GaN) adalah struktur sarang lebah heksagonal yang terdiri dari atom Ga dan N. Pada penelitian ini, dilakukan pemodelan material g-GaN dengan *defect* berupa *vacancy*, substitusi dan Stone-Wales pada g-GaN menggunakan *density functional theory* (DFT). Kajian stabilitas sistem dilakukan menggunakan energi formasi sedangkan kajian struktur elektronik dilakukan perhitungan rapat keadaan. Hasil perhitungan energi formasi pada kasus pada monovacancy menunjukkan bahwa konfigurasi  $V_N$  lebih stabil daripada  $V_{Ga}$ , pada kasus divacancy menunjukkan bahwa  $V_{GaGa}$  paling stabil. Sedangkan hasil perhitungan rapat keadaan, pada  $V_{Ga}$  diperoleh nilai energi gap sebesar 1,931 eV dan pada  $V_N$  tidak terdapat celah pita energi sehingga menjadi *metallic*. Pada sistem  $V_{GaGa}$  nilai energi gap sebesar 1,804 eV, pada  $V_{GaN}$  sebesar 1,940 eV dan pada  $V_{NN}$  berubah menjadi *metallic*. Dan pada kelompok substitusi,  $S_{Ga \rightarrow N}$  dan  $S_{N \rightarrow Ga}$  menjadi *metallic*, serta pada Interchange dan Stone-Wales sistem juga berubah menjadi *metallic*.

Kata kunci: g-GaN, *vacancy*, kestabilan, DFT

## ABSTRACT

### *Study of Stability Defective g-GaN using Density-Functional Theory (DFT)*

by

Malika Fadliiyana  
22/501807/PPA/06402

Graphene-like GaN (g-GaN) is a hexagonal honeycomb structure composed of Ga and N atoms. In this study, g-GaN material with defects in the form of vacancy, substitution and Stone-Wales is modeled using density functional theory (DFT) method. The stability study is carried out by calculating the formation energy while the electronic structure study is carried out by calculating the density of states. The results of the formation energy calculation in the case of monovacancy show that the VN configuration is more stable than VGa, in the case of divacancy shows that VGaGa is the most stable. While the results of the calculation of the density of states, in VGa obtained an energy gap value of 1.931 eV and in VN there is no energy band gap so that it becomes metallic. In the VGaGa system, the energy gap value is 1.804 eV, in VGaN it is 1.940 eV and in VNN it turns metallic. And in the substitution group, SGa→N and SN→Ga become metallic, and in Interchange and Stone-Wales the system also turns metallic.

*Key word: g-GaN, vacancy, substitution, stability, DFT*