KAJIAN STABILITAS KONFIGURASI VACANCY, SUBSTITUSI, INTERCHANGE, DAN STONE-WALES PADA MONOLAYER SNGE:
KOMPUTASI DENSITY FUNCTIONAL THEORY
Putri Awalia Shabrina, Prof. Sholihun, S.Si., M.Sc., Ph.D.Sc
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

Stabilitas dalam material semikonduktor merupakan aspek krusial yang perlu dipahami karena sangat memengaruhi fungsi dan kinerjanya dalam berbagai aplikasi teknologi modern, seperti optoelektronik, fotoelektronik, dan termoelektrik dengan efisiensi tinggi. Dalam penelitian ini, *monolayer* SnGe (*Stanum-Germanium*) berdimensi dua dikaji dengan struktur heksagonal yang diberikan empat jenis cacat, yaitu *vacancy* (kekosongan), substitusi, *interchange*, dan cacat Stone-Wales (SW). Analisis stabilitas dilakukan melalui perhitungan energi formasi untuk setiap konfigurasi *defect* yang mewakili kelayakan termodinamikanya. Selain itu, struktur elektronik dikaji menggunakan perhitungan rapat keadaan (*Density of States/*DOS) guna mengetahui perubahan sifat elektronik akibat adanya cacat. Berdasarkan energi formasi, hasil pada *defect monovacancy* menunjukkan bahwa V_{Ge} lebih stabil dibandingkan dengan hasil V_{Sn}. Kemudian, hasil V_{SnSn} menunjukkan kestabilan yang lebih tinggi dibandingkan dengan V_{SnGe} dan V_{GeGe}. Selain itu, pada defect substitusi, diketahui yang lebih stabil adalah substitusi S_{Ge} dibandingkan dengan S_{Sn}. Namun, di antara semua nilai energi formasi yang telah didapat, *defect* yang paling stabil adalah *defect* S_{Ge} dengan nilai $-6{,}13$ eV dan *defect* SW dengan nilai $-6{,}01$ eV. Kemudian, berdasarkan hasil PDOS yang telah didapat, semua *defect*, mulai dari *monovacancy* hingga SW, hasil yang didapatkan tetap *metallic* karena tidak adanya celah pita pada sekitar energi fermi. Hasil grafik PDOS pada tiap *defect* menunjukkan bahwa terdapat perilaku dopan tipe-p apabila diberi perlakuan lebih lanjut.

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
KAJIAN STABILITAS KONFIGURASI VACANCY, SUBSTITUSI, INTERCHANGE, DAN STONE-WALES PADA MONOLAYER SNGE:
KOMPUTASI DENSITY FUNCTIONAL THEORY
Putri Awalia Shabrina, Prof. Sholihun, S.Si., M.Sc., Ph.D.Sc
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

Stability in semiconductor materials is a crucial aspect that needs to be understood because it greatly affects their function and performance in various modern technological applications, such as optoelectronics, photoelectronics, and high-efficiency thermoelectrics. In this study, a two-dimensional SnGe (Stanum-Germanium) monolayer with a hexagonal structure was examined with four types of defects, namely vacancy, substitution, interchange, and Stone-Wales (SW) defects. Stability analysis was performed by calculating the formation energy for each defect configuration to represent its thermodynamic feasibility. In addition, the electronic structure was examined using density of states (DOS) calculations to determine the changes in electronic properties due to the presence of defects. Based on the formation energy, the results for monovacancy defects showed that V_{Ge} they were more stable than the results for V_{Sn}. Moreover, the results for V_{SnSn} show higher stability compared to V_{SnGe} and V_{GeGe}. Additionally, in terms of substitution defects, it is known that S_{Ge} substitution is more stable than S_{Sn}. However, among all the formation energy values obtained, the most stable defects are the S_{Ge} defect with a value of -6.13 eV and the SW defect with a value of -6.01 eV. Furthermore, based on the PDOS results obtained, all defects, ranging from monovacancies to SW, remained metallic due to the absence of band gaps around the Fermi energy. The PDOS graph results for each defect showed that there was p-type dopant behavior when further treatment was applied.