

INTISARI

TERMINASI ATOM HIDROGEN UNTUK REKAYASA SIFAT MAGNETIK STANENE: ANALISIS KOMPUTASI MENGGUNAKAN DFT (*DENSITY FUNCTIONAL THEORY*)

Oleh

AFIF RADITYA MUMTAZ

22/493237/PA/21169

Telah dilakukan analisis dan rekayasa sifat magnetik pada material stanene dengan metode komputasi menggunakan *density functional theory*. Terminasi dilakukan sebanyak sebelas variasi, termasuk penambahan pada bagian atas dan bawah permukaan. Digunakan kalkulasi *density of states* pada *majority spin* dan *minority spin* untuk mengetahui kemunculan sifat magnet akibat terminasi hidrogen. Setelah dilakukan kalkulasi didapatkan juga nilai momen magnet dan energi adsorpsinya. Diperoleh hasil bahwa semakin banyak terminasi hidrogen yang tidak simetris, maka semakin besar momen magnet yang didapatkan. Sebaliknya, terminasi hidrogen yang simetris cenderung menyebabkan tidak terbentuknya momen magnet total. Didapatkan juga pada seluruh variasi menunjukkan nilai energi adsorpsi yang negatif, dengan rentang sekitar $-15,57$ eV hingga $-2,75$ eV. Oleh karena itu, terminasi hidrogen pada stanene berpotensi untuk pengembangan aplikasi pada perangkat material magnetik.

Kata Kunci : DFT, Energi adsorpsi, Hidrogen, Momen magnet, Stanene

ABSTRACT

HYDROGEN TERMINATION FOR ENHANCING THE MAGNETIC PROPERTIES OF STANENE: A DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) COMPUTATIONAL ANALYSIS

By

AFIF RADITYA MUMTAZ

22/493237/PA/21169

An analysis and enhancement of the magnetic properties of stanene have been carried out using a computational approach based on the *Density Functional Theory* (DFT). Hydrogen termination was applied in eleven different configurations, including adsorption on both the upper and lower sides of the surface. To identify the emergence of magnetic properties induced by hydrogen termination, *density of states* (DOS) calculations were performed for both majority and minority spin channels. In addition, the magnetic moment and adsorption energy were evaluated for each configuration. The results indicate that an increase in asymmetrical hydrogen termination leads to a higher magnetic moment. In contrast, symmetrical hydrogen termination tends to result in the absence of a net magnetic moment due to spin compensation. Furthermore, all configurations exhibit negative adsorption energies, ranging from approximately -15.57 eV to -2.75 eV. Therefore, hydrogen termination in stanene shows strong potential for the development of magnetic material device applications.

Keywords : Adsorption Energy, DFT, Hydrogen, Magnetic Moment, Stanene