UNIVERSITAS
GADJAH MADA
**FORMASI KONFIGURASI DAN STRUKTUR ELEKTRONIK BILAYER h-SiC OLEH ADANYA PENGOTOR STRONSIUM DAN PERAK:
KOMPUTASI BERBASIS DENSITY FUNCTIONAL THEORY**
BRIGITA YULIANINGRUM, Sholihun.,S.Si.,M.Sc.,Ph.D
Universitas Gadjah Mada, 2018 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

ABSTRACT

CONFIGURATION FORMATION AND ELECTRONIC STRUCTURE OF h-SiC BILAYER BY IMPURITIES STRONTIUM AND SILVER: COMPUTATIONAL STUDY BASED ON DENSITY FUNCTIONAL THEORY

By

BRIGITA YULIANINGRUM
14/362779/PA/15824

SiC is a superior semiconductor material in extreme environments, high in power and frequency and has resistance to radiation. One of the application of SiC is as a protective layer in TRISO (Tristructural isotropic). However, it is known that some fission products such as Ag (argentum), Sr (strontium) and Cs (caesium) could escape from the SiC layer. This study was conducted using computational method based on Density Functional Theory to know the geometry structure and the band structure of pure bilayer SiC systems and defect systems of layer SiC with dopping of Sr and Ag by 1,5% in the hollow site position. It is found on the geometry structure of the system that Sr no longer occupies the hollow site position and binds to Si and C atoms while Ag remains in hollow site position on both AA and AB' stacking systems. From the band gap calculation of a pure bilayer system, it is found the presence of a direct band gap in around K point on AB'stacking system and indirect band gap on AA stacking system and the presence of impurity band gap in the defect system.

Keywords :*h-SiC*, *bilayer*, DFT, strontium, argentum, hollow site, formation energy, band gap.

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
**FORMASI KONFIGURASI DAN STRUKTUR ELEKTRONIK BILAYER h-SiC OLEH ADANYA PENGOTOR STRONSIUM DAN PERAK:
KOMPUTASI BERBASIS DENSITY FUNCTIONAL THEORY**
BRIGITA YULIANINGRUM, Sholihun.,S.Si.,M.Sc.,Ph.D
Universitas Gadjah Mada, 2018 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

INTISARI

FORMASI KONFIGURASI DAN STRUKTUR ELEKTRONIK *BILAYER h-SiC* OLEH ADANYA PENGOTOR STRONSIUM DAN PERAK: KOMPUTASI BERBASIS *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

Oleh

BRIGITA YULIANINGRUM
14/362779/PA/15824

SiC merupakan material semikonduktor yang unggul dalam lingkungan ekstrim, memiliki daya dan frekuensi tinggi serta memiliki ketahanan terhadap radiasi. Salah satu aplikasi dari SiC adalah sebagai lapisan pelindung pada TRISO *(Tristructural isotropic)*. Namun diketahui bahwa beberapa produk fisi seperti Ag (*argentum*), Sr (*strontium*) dan Cs (*caesium*) dapat lolos dari lapisan SiC tersebut. Penelitian ini dilakukan dengan menggunakan metode komputasi berbasis *Density Functional Theory* untuk mengetahui struktur geometri dan struktur pita tenaga pada sistem SiC *bilayer* murni dan sistem yang diberi *defect* Sr dan Ag sebesar 1,5 % pada posisi *hollow site*. Ditemukan pada struktur geometri sistem, *defect* Sr tidak lagi menempati posisi *hollow site* dan berikatan dengan atom Si dan C sementara *defect* Ag tetap menempati posisi *hollow site* baik pada sistem AA maupun AB' *stacking*. Pada perhitungan celah tenaga sistem *bilayer* murni ditemukan adanya celah tenaga langsung pada daerah K *point* pada AB' *stacking* serta celah tenaga tidak langsung pada AA *stacking* serta adanya *impurity band* pada sistem *defect*.

Kata-kata kunci : *h-SiC*, *bilayer*, DFT, stronsium, *argentum*, *hollow site*, energi formasi, pita tenaga.