

INTISARI

***MONOVACANCY* DAN *DIVACANCIES* PADA GERMANENE: KOMPUTASI BERBASIS DFT**

Oleh

DIAN PUTRI HASTUTI

17/418521/PPA/05305

Telah dilakukan studi terkait kestabilan sistem *monovacancy* dan *divacancies* pada germanene dengan menggunakan komputasi berbasis *Density Functional Theory* (DFT). Penelitian dilakukan dengan mengkontruksi super sel germanene yang merupakan material dua dimensi dari germanium yang berisi 72 atom. Analisis dilakukan pada konfigurasi hasil kalkulasi dari super sel yang diberi *defect* berupa *vacancy* untuk mengetahui perubahan geometri yang terjadi dan mengetahui kestabilan sistem. Pada sistem *monovacancy* dihasilkan dua konfigurasi MV_1 dan MV_2 dengan geometri berbeda setelah dikalkulasi. Dengan mempertimbangkan nilai energi formasi dari kedua sistem, MV_1 menjadi konfigurasi yang lebih stabil dibandingkan dengan MV_2 dengan selisih energi formasi sebesar 0.21 eV. Pada MV_1 ditemukan satu struktur *fourfold* dan dua pentagon, sedangkan pada MV_2 ditemukan satu pentagon dan satu *dangling bond*. Untuk sistem *divacancies*, didapatkan tiga konfigurasi dengan geometri berbeda DV_1 , DV_2 , dan DV_3 . Dari nilai energi formasi dalam sistem *divacancies*, DV_1 menjadi konfigurasi yang paling stabil karena nilai energinya yang paling rendah dari DV_2 dan DV_3 . Pada konfigurasi ini ditemukan dua pentagon dan satu oktagon. DV_2 menjadi konfigurasi meta-stabil karena nilai energi formasinya yang lebih rendah dibandingkan DV_3 . Pada konfigurasi DV_2 ini ditemukan dua pentagon dan dua struktur *fourfold*. Sedangkan untuk DV_3 menjadi konfigurasi yang paling tidak stabil karena memiliki energi formasi yang paling tinggi. Pada DV_3 ini ditemukan dua *dangling bond* dan satu tetragon. Hasil-hasil ini sesuai dengan teori *Dangling Bond Counting Model*.

Kata-kata kunci : germanene, DFT, vacancy.

ABSTRACT

DENSITY-FUNCTIONAL-THEORY STUDY OF GERMANENE *MONOVACANCY* AND *DIVACANCIES*

By

DIAN PUTRI HASTUTI

17/418521/PPA/05305

By using density functional theory (DFT), we investigated the stability of mono- and divacancies in germanene. We modelled the vacancies system in supercell consisted 72 atoms of germanene which is 2D material of Germanium. We analyzed the relaxed configurations to investigate the new geometry and stability of the vacancies system. In monovacancy, we found two relaxed configurations (MV_1 and MV_2). MV_1 becomes the most stable configuration due its lower formation energy compared to MV_2 with 0.21 eV difference. In the configuration of MV_1 there are two pentagons, meanwhile in MV_2 , there are one pentagon and one dangling bond. For divacancies, DV_1 becomes the most stable configuration based on its lowest formation energy compared to DV_2 and DV_3 and DV_{12} becomes the meta-stable configuration due its lower formation energy compared to DV_3 . There are an octagon and two pentagons in DV_1 configuration. In DV_2 , there are two pentagons, one tetragon, and two fourfold. And there are one tetragon and two dangling bonds in the the most unstable configuration, DV_3 . These results are in an agreement with Dangling Bond Counting Model (DBCM) theory. Keywords : germanene, DFT, vacancy.