



INTISARI

OPTIMASI GEOMETRI IMPURITAS C_u PADA *GERMANENE* : KOMPUTASI BERBASIS *AB INITIO*

Oleh

DHEA AMANDA
13/348618/PA/15462

Telah dilakukan perhitungan energi formasi dan pita energi untuk interaksi Cu pada material dua dimensi germanium dengan struktur honeycomb (*germanene*) melalui komputasi berbasis *density functional theory* (DFT). Dari hasil perhitungan energi, diperoleh bahwa struktur *germanene* yang stabil adalah struktur heksagonal yang memiliki *buckling*. Analisa pita energi menunjukkan karakteristik *massless Dirac Fermions*. Kemudian dilakukan penelitian terkait struktur geometri dan energi formasi sistem impuritas Cu pada *germanene* dengan melakukan variasi berbagai konfigurasi posisi atom Cu. Diperoleh hasil bahwa sistem yang paling stabil adalah sistem *germanene* dengan atom Cu berada di posisi heksagonal dengan energi formasi sebesar -2.01 eV. Adsorpsi logam transisi Cu menyebabkan *Dirac point* bergerak ke bawah *fermi level* sehingga menyebabkan atom Cu memiliki karakteristik seperti doping tipe-n.

Kata-kata kunci : *germanene*, energi formasi, impuritas, Cu



ABSTRACT

GEOMETRY OPTIMIZATION OF C_u DOPED *GERMANENE* : A COMPUTATIONAL STUDY BASED ON THE AB INITIO

By

DHEA AMANDA
13/348618/PA/15462

By using the density functional theory (DFT), we perform calculations of formation energy and band structure of the Cu impurity on germanene. From the energy calculation, we show that the buckled germanene is more stable than the planar one. Analysis of the electronic band structure shows to the massless Dirac Fermion characteristics. Next, we optimize and calculate the formation energy of the Cu-doped germanene by varying the Cu positions. We find that the most stable configuration is the hallow-site configuration with formation energy is -2.01 eV. The adsorption of Cu displaces the Diract point move to below the Fermi level, thus Cu behaves as n-type doping.

Keywords : *germanene*, *dirac fermion*, energy formation, impurity Cu