

INTISARI

ADSORPSI O₂ DAN NO₂ PADA GERMANENE : KOMPUTASI BERBASIS DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Oleh

Savira Hanandita

13/347733/PA/15358

Germanene merupakan germanium dua dimensi, yang dalam berbagai aspek memiliki kesamaan dengan *graphene* (grafit dua dimensi) pendahulunya. Perbedaan dengan pendahulunya adalah *honeycomb lattice* pada *germanene* terdapat lekukan. Dengan menggunakan kalkulasi *Density Functional Theory* (DFT) dilakukan perhitungan energi formasi pada *germanene* dengan adsorpsi O₂ dan NO₂. Di suhu ruangan, O₂ mudah terdisosiasi pada *germanene*, sehingga pada konfigurasi *w* terjadi proses difusi yang menyebabkan ikatan O₂ terlepas dan membentuk ikatan O-Ge. Dari kalkulasi didapat adsorpsi oksigen pada *germanene* terjadi secara kimia (*chemisorbed*). Didapat 2 konfigurasi yang stabil untuk O₂ adalah *hollow-site* dan *w-site* dengan energi formasi -0,99 eV dan -0,91. Selain oksigen, dicoba kalkulasi senyawa lain yang mengandung oksigen yaitu NO₂. Dari hasil kalkulasi NO₂, didapatkan bahwa adsorpsi NO₂ terjadi secara kimia dan konfigurasi *hollow-site* memiliki energi formasi sebesar -0,98 eV, untuk *bridge-site* sebesar -0,89 eV.

Kata kunci : *germanene*, material dua dimensi, DFT, adsorpsi kimia, energi formasi.

ABSTRACT

O₂ AND NO₂ ADSORPTION ON GERMANENE : DENSITY FUNCTIONAL THEORY BASED CALCULATIONS

Oleh

Savira Hanandita

13/347733/PA/15358

Germanene is two dimensional germanium. Germanene has many similar characteristics with graphene. The difference between germanene and graphene is that the honeycomb lattice of germanene is buckled. By using the density functional theory (DFT), we perform calculations of formation energy of the oxygen impurity on germanene. In room temperature, germanene is easily dissociated, thus diffusion process happened in w-site making O₂ bond dissociated into two O atoms. The results show that O₂ is chemisorbed on germanene. We got two stable configurations for O₂ which are hollow-site and w-site configuration. The formation energy (adsorption energy) of hollow-site and w-site are -0.99 eV and -0.91 eV. Further research, NO₂ is calculated for containing O₂. The result shows that NO₂ chemisorbed on germanene. Hollow site and bridge site configurations are calculated. Formation energies of hollow site and bridge site are -0.98 eV and -0.89 eV.

Keywords: germanene, two dimensional material, DFT, chemisorb, formation energy