

**STUDI KOMPUTASI PENGARUH *STRAIN* TERHADAP STRUKTUR
ELEKTRONIK GeC MENGGUNAKAN *DENSITY FUNCTIONAL THEORY***

TUGAS AKHIR

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh derajat Sarjana S1

Program Studi Fisika



Disusun oleh

Dian Indiasuti

20106020025

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UIN SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

2024

HALAMAN PENGESAHAN



KEMENTERIAN AGAMA
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
Jl. Marsda Adisucipto Telp. (0274) 540971 Fax. (0274) 519739 Yogyakarta 55281

PENGESAHAN TUGAS AKHIR

Nomor : B-163/Un.02/DST/PP.00.9/01/2024

Tugas Akhir dengan judul : Studi Komputasi Pengaruh Strain Terhadap Struktur Elektronik GeC Menggunakan Density Functional Theory

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : DIAN INDIASTUTI
Nomor Induk Mahasiswa : 20106020025
Telah diujikan pada : Kamis, 25 Januari 2024
Nilai ujian Tugas Akhir : A

dinyatakan telah diterima oleh Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

TIM UJIAN TUGAS AKHIR



Ketua Sidang

Dr. Widayanti, S.Si. M.Si.
SIGNED

Valid ID: 65b707c4b8e03



Penguji I

Frida Agung Rakhmadi, S.Si., M.Sc.
SIGNED

Valid ID: 65b5eb578e576



Penguji II

Dr. Nita Handayani, S.Si, M.Si
SIGNED

Valid ID: 65b5a18010988



Yogyakarta, 25 Januari 2024
UIN Sunan Kalijaga
Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

Prof. Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 65b73a11bc11d

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Dian Indiasuti
NIM : 20106020025
Program Studi : Fisika
Fakultas : Sains dan Teknologi

Menyatakan bahwa skripsi saya yang berjudul “Studi Komputasi Pengaruh *Strain* Terhadap Struktur Elektronik GeC Menggunakan *Density Functional Theory*” merupakan hasil penelitian saya sendiri, tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu perguruan tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan orang lain kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Yogyakarta, 16 Januari 2024

Penulis



Dian Indiasuti
NIM. 20106020025

SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga



FM-UINSK-BM-05-03/R0

SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR

Hal : Persetujuan skripsi
Lamp : -

Kepada
Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta
di Yogyakarta

Assalamu'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : DIAN INDIASTUTI
NIM : 20106020025
Judul Skripsi : Studi Komputasi Pengaruh *Strain* Terhadap Struktur Elektronik GeC Menggunakan *Density Functional Theory*

sudah dapat diajukan kembali kepada Program Studi Fisika Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam bidang Fisika.

Dengan ini kami berharap agar skripsi/tugas akhir Saudara tersebut di atas dapat segera dimunaqasyahkan. Atas perhatiannya kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 18 Januari 2024

Pembimbing II

Sri Hidayati, M.Sc.
NIP. 19940527 000000 2 101

Pembimbing I

Dr. Widayanti, S.Si, M. Si.
NIP. 19760526 200604 2 005

STUDI KOMPUTASI PENGARUH *STRAIN* TERHADAP STRUKTUR ELEKTRONIK GeC MENGGUNAKAN *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

Dian Indiaستی
20106020025

INTISARI

Telah dilakukan kajian komputasi tentang pengaruh *strain* dan *stress* terhadap struktur geometri dan struktur elektronik GeC. Penelitian ini bertujuan untuk mengoptimasi struktur kristal GeC dan menganalisis pengaruh *strain* dan *stress* terhadap struktur elektronik GeC. Metode yang digunakan pada penelitian ini adalah *Density Functional Theory* (DFT) dengan fungsi *exchange-correlation generalized gradient approximation* (GGA) berbasis Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) dan tipe *pseudopotensial ultrasoft*. Pada penelitian ini, variasi *strain* dan *stress* yang diberikan sebesar 0,1; -0,1; 0,2; -0,2; 0,3; -0,3; 0,4; -0,4; 0,5; dan -0,5. Pemberian *strain* dan *stress* pada struktur kristal GeC menunjukkan bahwa ketika kisi kristal diberikan *strain* dan *stress*, atom-atom dalam kisi tersebut akan bergerak untuk mengatasi deformasi. Jika pemberian *strain* dan *stress* terus-menerus diberikan meskipun telah terjadi deformasi plastik, maka ikatan antar atom dapat putus dan menyebabkan pembentukan cacat kristal. Hasil pemberian variasi *strain* 0,2 hingga 0,4 dan *stress* -0,2 hingga -0,4 pada unit sel GeC menunjukkan ikatan yang putus dan dapat mengganggu kestabilan geometri material. *Strain* dan *stress* terbukti dapat mengubah nilai energi celah pita, jika dibandingkan dengan sistem murni. Sistem murni memiliki energi celah pita sebesar 2,022 eV yang mana nilai tersebut akurat karena memiliki selisih yang sangat kecil dengan penelitian sebelumnya yakni sebesar 0,075 eV. Pemberian *strain* (0,1; 0,2; 0,3) cenderung memperkecil energi celah pita dan *stress* (-0,1; -0,2; -0,4) memperbesar energi celah pita. Struktur pita dari semua sistem unit sel GeC pada penelitian ini menunjukkan sifat celah pita *direct band gap* kecuali pada *stress* dengan variasi -0,3 sebab terjadi tumpang tindih antara VBM dan CBM di bawah energi fermi sehingga material dalam keadaan tersebut tergolong sebagai konduktor.

Kata kunci: *Density Functional Theory*, GeC, *Strain*, *Stress*, Struktur elektronik

**COMPUTATIONAL STUDY OF THE INFLUENCE OF STRAIN ON THE
ELECTRONIC STRUCTURE OF GeC USING
DENSITY FUNCTIONAL THEORY**

Dian Indiastuti
20106020025

ABSTRACT

A computational study has been carried out on the influence of strain and stress on the geometric structure and electronic structure of GeC. This research aims to optimize the GeC crystal structure and analyze the influence of strain and stress on the electronic structure of GeC. The method used in this research is Density Functional Theory (DFT) with an exchange-correlation generalized gradient approximation (GGA) function based on Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) and ultrasoft pseudopotential type. In this study, the variation in strain and stress given was 0.1; -0.1; 0.2; -0.2; 0.3; -0.3; 0.4; -0.4; 0.5; and -0.5. The application of strain and stress to the GeC crystal structure shows that when the crystal lattice is subjected to strain and stress, the atoms in the lattice will move to overcome the deformation. If strain and stress are continuously applied even though plastic deformation has occurred, the bonds between atoms can break and cause the formation of crystal defects. The results of varying the strain from 0.2 to 0.4 and stress from -0.2 to -0.4 on the GeC unit cell show that the bonds are broken and can disrupt the geometric stability of the material. Strain and stress are proven to change the band gap energy value, when compared to a pure system. The pure system has a band gap energy of 2.022 eV, which is an accurate value because it has a very small difference with previous research, namely 0.075 eV (Vu et al., 2019). Applying a strain (0.1; 0.2; 0.3) tends to reduce the band gap energy and stress (-0.1; -0.2; -0.4) increases the band gap energy. The band structure of all GeC unit cell systems in this study shows direct band gap properties except at stress with a variation of -0.3 because there is an overlap between VBM and CBM below the Fermi energy so that the material in this condition is classified as a conductor.

Keywords: *Density Functional Theory, GeC, Strain, Stress, Electronic structure*

MOTTO

“Don’t lose hope, nor be sad”

-Qur’an 3:139-



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

PERSEMBAHAN

**KEPADA BAPAK DAN IBU ATAS SEGALA DOA, DUKUNGAN, DAN
NASIHAT SELAMA MENEMPUH PENDIDIKAN SARJANA INI<3**



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis ucapkan kepada Allah SWT atas limpahan rahmat dan karunia-Nya sehingga tugas akhir ini dapat terselesaikan dengan baik. Skripsi atau tugas akhir merupakan syarat wajib yang harus dipenuhi mahasiswa Program Studi Fisika Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta untuk menyelesaikan strata S1.

Tugas akhir ini dapat terlaksana karena dukungan berbagai pihak. Maka dari itu, penulis menyampaikan ucapan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada semua pihak yang telah membantu dalam penelitian tugas akhir termasuk penyusunan laporan ini, diantaranya kepada :

1. Ibu Anis Yuniati, S. Si., M. Si., Ph. D., selaku Ketua Program Studi Fisika, Fakultas Sains dan Teknologi, UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta, yang telah memberikan izin pelaksanaan tugas akhir ini.
2. Ibu Dr. Widayanti, S. Si., M. Si., selaku dosen pembimbing pertama, yang senantiasa memberikan pengarahan dan bimbingan dalam pelaksanaan penelitian tugas akhir.
3. Ibu Sri Hidayati, M. Sc., selaku dosen pembimbing kedua, atas segala arahan dalam pelaksanaan penelitian dan penyusunan laporan tugas akhir.
4. Bapak Andi M. Sc., selaku dosen pembimbing akademik yang telah memberikan arahan dan dukungan dalam pelaksanaan tugas akhir.
5. Seluruh dosen Fisika UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta, yang telah mengarahkan dan membantu penguasaan dasar-dasar materi Fisika, sehingga dapat menyusun laporan penelitian tugas akhir dengan baik.
6. Bapak Padmo Harjono dan Ibu Marsini selaku orang tua penulis yang selalu memberikan doa serta dukungan sehingga penulis dapat menjalani segala proses pendidikan dengan baik.

7. Mba Farahdina Zain yang telah membagikan ilmu terkait penelitian yang dilakukan dan dukungan dalam penulisan tugas akhir.
8. Teman-teman Fisika UIN Sunan Kalijaga angkatan 2020 dan teman-teman lainnya yang tidak dapat disebutkan satu-persatu, atas semangat dan dukungan yang luar biasa dalam seluruh rangkaian pelaksanaan tugas akhir.

Demikian pengantar ini dibuat, penulis menyadari adanya keterbatasan pengetahuan yang penulis miliki. Maka dari itu, penulis mengharapkan adanya saran dan kritik membangun untuk pengembangan penelitian di masa yang akan datang. Semoga laporan ini dapat bermanfaat bagi penulis dan pembaca pada umumnya.

Yogyakarta, 13 November 2023



Penulis

Dian Indiastuti

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN	iii
SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR.....	iv
INTISARI.....	v
ABSTRACT.....	vi
MOTTO	vii
PERSEMBAHAN	viii
KATA PENGANTAR.....	ix
DAFTAR ISI	xi
DAFTAR TABEL	xiv
DAFTAR GAMBAR.....	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1. Latar Belakang	1
1.2. Rumusan Masalah	7
1.3. Tujuan Penelitian.....	8
1.4. Batasan Masalah	8

1.5. Manfaat Penelitian.....	8
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	10
2.1. Studi Pustaka	10
2.2. Landasan Teori.....	16
2.2.1 Germanium Karbida (GeC).....	16
2.2.2 Mekanika Kuantum Partikel Banyak.....	17
2.2.3 <i>Density Functional Theory</i> (DFT).....	21
2.2.4 Fungsional <i>Exchange-Correlation</i>	25
2.2.5 <i>Pseudopotensial</i>	27
2.2.6 Struktur Kristal.....	29
2.2.7 Tegangan (<i>Stress</i>)	32
2.2.8 Regangan (<i>Strain</i>).....	33
2.2.9 Wawasan Keislaman tentang Atom dan Molekul	33
BAB III METODE PENELITIAN	35
3.1. Waktu dan Tempat Penelitian.....	35
3.2. Alat dan Bahan Penelitian	35
3.3. Prosedur Penelitian.....	36
3.3.1 Studi Pendahuluan	37

3.3.2 Konstruksi Unit Sel	38
3.3.3 Optimasi Konstanta Kisi	39
3.3.4 Pemberian <i>Strain</i> dan <i>Stress</i>	41
3.3.5 Penghitungan Struktur Elektronik	43
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	46
4.1. Hasil Penelitian	46
4.1.1 Struktur Kristal GeC Teroptimasi dengan Variasi <i>Strain</i> dan <i>Stress</i>	46
4.1.2 Struktur Elektronik GeC dengan Variasi <i>Strain</i> dan <i>Stress</i>	49
4.2. Pembahasan	55
4.2.1 Analisis Struktur Kristal GeC Teroptimasi dengan Variasi <i>Strain</i> dan <i>Stress</i>	55
4.2.2 Analisis Struktur Elektronik GeC dengan Variasi <i>Strain</i> dan <i>Stress</i>	57
4.2.3 Kajian Integrasi-Interkoneksi	64
BAB V PENUTUP	66
5.1. Kesimpulan	66
5.2. Saran	67
DAFTAR PUSTAKA.....	68
LAMPIRAN	73

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Tinjauan pustaka penelitian.....	14
Tabel 3.1 Spesifikasi laptop.....	35
Tabel 3.2 Perangkat lunak dalam penelitian.....	36
Tabel 3.3 Parameter akurasi penelitian	37
Tabel 3.4 Koordinat atom GeC	39
Tabel 4.1 Jarak antar atom (D) GeC dengan variasi <i>strain</i>	49
Tabel 4.2 Jarak antar atom (D) GeC dengan variasi <i>stress</i>	49
Tabel 4.3 Energi celah pita GeC dengan variasi <i>strain</i>	54
Tabel 4.4 Energi celah pita GeC dengan variasi <i>stress</i>	54



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Struktur kristal GeC	17
Gambar 2.2 <i>Self Consistent Field</i> (SCF) (Sholihun, 2015)	25
Gambar 2.3 Rute zona <i>Brillouin</i> pada struktur heksagonal (Bernal, 2019)	31
Gambar 3.1 Diagram alir penelitian.....	36
Gambar 3.3 Ilustrasi pemberian (a) <i>Strain</i> (b) <i>Stress</i>	42
Gambar 3.4 Rute <i>Brillouin Zone</i> pada GeC.....	44
Gambar 4.1 Hasil konstruksi geometri unit sel GeC.....	46
Gambar 4.2 Grafik hubungan energi total (eV) dan volume unit sel (\AA^3).....	47
Gambar 4.3 Struktur kristal teroptimasi unit sel GeC murni.....	47
Gambar 4.4 Struktur kristal teroptimasi unit sel GeC dengan variasi <i>strain</i> (a) 0,1 (b) 0,2 (c) 0,3 (d) 0,4.....	48
Gambar 4.5 Struktur kristal teroptimasi unit sel GeC dengan variasi <i>stress</i> (a) -0,1 (b) -0,2 (c) -0,3 (d) -0,4.....	48
Gambar 4.6 Skema jarak antar atom pada struktur kristal GeC	49
Gambar 4.7 Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) GeC murni	50
Gambar 4.8 Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) GeC dengan variasi <i>strain</i> 0,1	50
Gambar 4.9 Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) GeC dengan variasi <i>strain</i> 0,2	51
Gambar 4.10 Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) GeC dengan variasi <i>strain</i> 0,3	51

Gambar 4.11 Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) GeC dengan variasi <i>strain</i>	
0,4	52
Gambar 4.12 Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) GeC dengan variasi <i>stress</i>	
-0,1	52
Gambar 4.13 Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) GeC dengan variasi <i>stress</i>	
-0,2	53
Gambar 4.14 Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) GeC dengan variasi <i>stress</i>	
-0,3	53
Gambar 4.15 Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) GeC dengan variasi <i>stress</i>	
-0,4	54
Gambar 4.16 VBM, CBM, energi celah pita, dan energi fermi pada struktur kristal GeC murni	58
Gambar 4.17 Contoh puncak DOS pada GeC murni	62

BAB I

PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Penelitian mengenai material 2D berkembang sangat pesat sejak dilakukannya isolasi graphene oleh Novoselov dkk (2004). Selain itu, karakteristik dari material 2D yang berupa struktur seperti lembaran, membuatnya memiliki fleksibilitas yang baik, kekuatan yang tinggi, sifat yang sangat ringan, modulus elastisitas yang tinggi, sifat optis yang baik, dan superkonduktivitas. Faktor-faktor tersebut menjadi alasan mengapa penelitian mengenai material 2D mengalami perkembangan yang sangat pesat. Terlebih lagi, dari karakteristik tersebut menjadikan material 2D dapat diaplikasikan dalam berbagai bidang, seperti fotovoltaiik atau sel surya, nanoteknologi, dan optoelektronika (Singh dkk, 2021).

Sejak ditemukannya graphene yang memiliki bentuk *honeycomb* pada tahun 2004, diketahui bahwa graphene memiliki sifat khas seperti, kuantisasi setengah bilangan bulat dari konduktansi Hall, memiliki stabilitas kimia yang tinggi, dan efek ambipolar (Novoselov dkk, 2004). Selain sifat khas tersebut, graphene memiliki karakter simetri atom C pada struktur *honeycomb* 2D sehingga menyebabkan graphene menjadi pembawa muatan berperilaku seperti fermion tidak bermassa, dengan hubungan dispersi linier π dan pita π^* pada titik zona *Brillouin*. Namun, aplikasi yang dapat diterapkan dari graphene terbatas karena celah pita pada titik K zona *Brillouin* yang tertutup (Xu dkk, 2016).

Selain graphene, contoh material 2D lainnya yaitu, silikon (Si) dan germanium (Ge). Silikon memiliki sifat elektronik dengan celah pita yang lebar sebesar 2,55 eV. Celah pita yang dimiliki oleh silikon tersebut membuatnya tidak sesuai untuk diaplikasikan pada fotovoltaik karena memiliki koefisien penyerapan energi yang rendah (Xu dkk, 2016). Sementara itu, germanium memiliki celah pita yang relatif lebih kecil, yakni sebesar 0,67 eV membuatnya sesuai untuk diterapkan pada aplikasi di bidang fotovoltaik (Zhao dkk, 2020). Selain itu, menurut Niu dkk (2005) germanium yang dipadukan dengan unsur karbon (C) menjadi GeC memiliki celah pita yang lebih kecil lagi daripada unsur germanium saja, yakni 0,15 eV sehingga membuatnya menjadi material yang sesuai untuk aplikasi sel surya karena memiliki koefisien penyerapan energi yang jauh lebih tinggi.

Germanium karbida (GeC) adalah material 2D kombinasi germanium dengan karbon. Dalam GeC, atom karbon dan germanium disusun dalam kisi heksagonal planar (mirip dengan lembaran graphene) dengan sp^2 hibridisasi. GeC memiliki *space group* berupa $P\bar{6}m2$ (Vu dkk, 2019) dan keadaan stabil terletak pada struktur heksagonal planar (Guilhon dkk, 2015). Berdasarkan celah pita yang dimiliki oleh GeC yaitu berukuran yang relatif kecil membuat GeC sesuai untuk digunakan pada aplikasi bidang tertentu, seperti fotovoltaik, optoelektronika, dan nanoteknologi (Vu dkk, 2019).

Pada bidang fotovoltaik, GeC berperan menyerap spektrum sinar matahari karena memiliki perbedaan massa unsur yang besar yang mana dapat mencegah peluruhan

fonon optik sehingga memperlambat laju pendinginan pada sel surya (Shrestha dkk, 2012). Kemudian, pada penelitian yang dilakukan oleh Abdullahi dan Ersan (2023) diketahui bahwa GeC memiliki potensi sebagai membran yang baik untuk proses permeasi molekul dan atom karena hambatan energi difusinya sehingga menjadikan GeC sangat potensial diterapkan pada bidang nanoteknologi untuk nanomembran pemurnian air maupun pencampuran gas. Sementara itu, dalam bidang optoelektronika GeC sebagai semikonduktor *p-n junction* berperan sebagai penyerap energi foton dalam proses penyinaran cahaya pada perangkat optoelektronika. Hal tersebut karena optoelektronika perlu sumber cahaya dari bahan semikonduktor, seperti GeC sebagai dasar pembentukan sumber cahaya agar sistem optoelektronika dapat bekerja pada rentang panjang gelombang ultra violet, cahaya tampak maupun infra merah, sehingga sumber cahaya dapat meradiasi foton dengan panjang gelombang dalam rentang $0,1 \mu\text{m} - 20 \mu\text{m}$ (Tim Dosen Optoelektronika, 2019).

Peran dari GeC yang sangat potensial dalam berbagai bidang menjadikan GeC banyak diteliti oleh peneliti dalam beberapa dekade terakhir. Contohnya, penelitian yang dilakukan oleh Mahmood dan Sansores (2005) mengkaji mengenai penghitungan struktur pita dan modulus bulk dari GeC dengan dua politipe yakni 3C dan 2H dengan metode komputasi menggunakan *Density Functional Theory* (DFT). Hasil penghitungan yang diperoleh menunjukkan bahwa besarnya energi celah pita pada masing-masing politipe sebesar 1,76 eV (3C-GeC) dan 2,5 eV (2H-GeC). Berdasarkan energi celah pita yang diperoleh tersebut, menunjukkan bahwa 3C-GeC dan 2H-GeC

termasuk bahan semikonduktor dengan celah pita tidak langsung yang mengkristal dalam struktur *zinblend* (3C-GeC) dan *wurtzite* (2H-GeC). Selain itu, dilakukan juga penghitungan modulus bulk menggunakan *Birch Murnaghan Equation of States* untuk mengukur kekerasan dari GeC. Hasil dari penghitungan modulus bulk diperoleh modulus bulk pada 3C-GeC dan 2H-GeC sebesar 182,94 Gpa dan 211,57 GPa. Dari hasil penelitian tersebut, dikatakan bahwa GeC memiliki potensi dalam aplikasi optoelektronika.

Penelitian lain yang berkaitan dengan GeC juga dilakukan oleh Zhang dan Cui (2022) yang mengkaji atom non-logam yang teradsorpsi ke dalam sistem GeC dengan metode komputasi menggunakan DFT. Hasil yang diperoleh dari penelitian tersebut menunjukkan bahwa adsorpsi paling stabil terletak pada atom non-logam sedangkan adsorpsi terkuat terletak pada atom C-GeC. Adsorpsi dari atom non-logam menyebabkan perubahan sifat elektronik, optik, dan magnetik pada sistem GeC. Perubahan dari sifat-sifat tersebut yang menyebabkan adsorpsi atom non-logam memperluas penerapan dari GeC 2D, khususnya pada pemancar elektron, sel fotovoltaik, dan detektor fotolistrik ultraviolet.

Penelitian lebih lanjut mengenai GeC menarik untuk dilakukan terutama yang berkaitan dengan sifat elektronik berupa pita energi dan rapat keadaan. Hal tersebut dilakukan sebab potensi dari GeC yang dapat diaplikasikan di berbagai bidang karena celah pitanya yang relatif kecil. Namun, pada penelitian yang dilakukan oleh Ghossein dkk (2020) mengenai analisis bahan nano 2D berbasis germanium dengan metode komputasi menggunakan DFT menyatakan bahwa GeC memiliki energi celah

pita (3,50 eV) terbesar dibandingkan dengan bahan nano 2D berbasis germanium lainnya. Berdasarkan hasil penelitian tersebut, dikatakan juga bahwa GeC berpotensi sebagai fotokatalisis untuk pemisahan air berdasarkan hasil tepi pita valensi dan konduksi yang diperoleh pada lempengan *supercell*. Aktivitas fotokatalisis pada suatu material berkaitan erat dengan energi celah pita dari material itu sendiri yang mana agar mekanisme reaksi fotokatalisis dapat terjadi maka energi foton yang datang harus lebih besar atau sama dengan energi celah pita dari material fotokatalisis (Kumar dan Pandey, 2017). Nilai energi celah pita pada GeC yang terlalu besar tersebut hanya mampu bereaksi pada spektrum sinar UV sehingga menyebabkan penggunaan radiasi sinar matahari pada GeC sangat rendah dan dapat menjadikannya memiliki kemampuan fotokatalisis yang kurang efisien (Janczarek dan Kowalska, 2021). Salah satu cara untuk memperkecil energi celah pita agar kinerja fotokatalisis GeC dapat bekerja dalam rentang sinar tampak, yaitu dengan pemberian perlakuan mekanis berupa *strain* dan *stress*.

Pemberian *strain* dan *stress* pada bahan semikonduktor diketahui dapat mempengaruhi kinerja serta sifat fisis dari semikonduktor tersebut, seperti reaktivitas, konduktivitas, kemagnetan, sifat feroelektrik, dan struktur elektronik (Pang, 2020). Pemberian *strain* merupakan pemberian beban atau gaya pada suatu material yang menyebabkan material tersebut mengalami perubahan panjang menjadi lebih panjang (ekspansi). Kemudian, pemberian *stress* merupakan pemberian beban atau gaya pada suatu material yang menyebabkan material tersebut mengalami perubahan panjang menjadi lebih pendek (kompresi). Telah banyak penelitian yang dilakukan untuk

membuktikan bahwa pemberian *strain* dan *stress* dapat menyebabkan perubahan struktur elektronik dan energi celah pita dari bahan semikonduktor. Salah satunya, penelitian yang dilakukan oleh Luo dan Xu (2019) menunjukkan bahwa pemberian *stress* atau regangan kompresif pada *monolayer* GeC membuat celah pita dari *monolayer* GeC meningkat dari 2,09 eV menjadi 2,62 eV. Pemberian *strain* atau regangan tarik terjadi perubahan celah pita yang membuat *monolayer* GeC menjadi bahan bersifat konduktor. Hal tersebut menunjukkan bahwa celah pita dari *monolayer* GeC dapat dikendalikan dengan adanya pemberian perlakuan mekanis berupa regangan tarik dan regangan kompresif untuk aplikasi nanoelektrik.

Pemberian *strain* dan *stress* dapat diteliti secara komputasi untuk memprediksi pengaruh perlakuan tersebut pada struktur elektronik dari GeC. DFT merupakan metode pencarian energi menggunakan kerapatan muatan untuk menghitung struktur elektronik atom, molekul, kristal, permukaan, dan interaksinya dari suatu material (Argaman dan Makov, 2000). DFT menggunakan persamaan Kohn-Sham yang merupakan persamaan numerik dari persamaan Schrödinger (Alfianto, 2015). DFT tergolong efektif untuk memodelkan material karena variabel kerapatan elektron dalam DFT dijaga tetap dan tidak terpengaruh oleh ukuran sistem, di mana pada metode *ab initio* Hartree-Fock kompleksitas fungsi gelombang akan semakin meningkat seiring bertambahnya jumlah elektron (Sousa dkk, 2007). Penelitian dengan menggunakan DFT dalam mempelajari pengaruh *strain* dan *stress* pada material telah banyak dilakukan, seperti Hidayati dan Sholihun (2022) yang mempelajari pengaruh regangan

biaksial pada struktur pita *monolayer* GaN dengan DFT. Selain itu, Hu dkk (2011) mempelajari pengaruh pemberian *stress* terhadap struktur elektronik ekstrinsik pada Si, Al, GaAs, dan ZrO₂ menggunakan DFT.

Penghitungan struktur elektronik dilakukan dalam keadaan energi minimum. Hal tersebut dikarenakan struktur elektronik dengan energi minimum akan merepresentasikan konfigurasi geometri yang paling stabil serta mendekati keadaan alami material (Sholl dan Steckel, 2009). Pada DFT, keadaan energi minimum dapat diperoleh dengan melakukan optimasi geometri struktur kristal. Penelitian mengenai optimasi struktur kristal telah banyak dilakukan, salah satunya ialah penelitian yang dilakukan oleh Pamungkas dkk (2013) melakukan optimasi geometri struktur kristal untuk memperoleh konfigurasi geometri yang paling stabil dari molekul Boron nitride nanotube (BNNT).

Berdasarkan pernyataan di atas, penelitian ini bertujuan untuk melakukan optimasi geometri untuk memperoleh struktur kristal GeC teroptimasi. Kemudian menganalisis pengaruh pemberian *strain* dan *stress* pada struktur elektronik GeC. Penelitian ini dilakukan secara komputasi menggunakan DFT.

1.2. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas, dapat dirumuskan masalah sebagai berikut :

1. Bagaimana optimasi struktur kristal GeC?
2. Bagaimana pengaruh pemberian variasi *strain* dan *stress* terhadap struktur elektronik GeC?

1.3. Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah di atas, maka penelitian bertujuan sebagai berikut :

1. Mengoptimasi struktur kristal GeC.
2. Menganalisis pengaruh pemberian variasi *strain* dan *stress* terhadap struktur elektronik GeC.

1.4. Batasan Masalah

Batasan masalah dalam penelitian ini sebagai berikut :

1. Fungsi *exchange-correlation* yang digunakan dalam penelitian ini ialah *generalized gradient approximation* (GGA) berbasis Perdew-Burke Ernzerhof (PBE) dengan tipe *pseudopotensial ultrasoft*.
2. Proses optimasi konstanta kisi menggunakan metode *fitting Birch Murnaghan Equation of States* (BM-EOS).
3. Variasi *strain* dan *stress* yang diberikan sebesar 0,1; -0,1; 0,2; -0,2; 0,3; -0,3; 0,4; dan -0,4.

1.5. Manfaat Penelitian

Manfaat yang diharapkan dari penelitian ini ialah dapat berkontribusi untuk akademisi maupun peneliti. Berikut ini merupakan manfaat yang diharapkan dari penelitian ini diantaranya yaitu :

1. Penelitian ini diharapkan dapat memberikan wawasan maupun pengetahuan yang dibutuhkan dalam penelitian mengenai material GeC melalui kajian komputasi.

2. Hasil penelitian yang diperoleh dapat berkontribusi dalam bidang sel surya, fotovoltaik, nanoteknologi maupun aplikasi yang lain dari material yang berbahan GeC.



BAB V

PENUTUP

5.1. Kesimpulan

Berdasarkan hasil dan pembahasan yang dipaparkan pada Bab IV, diperoleh beberapa kesimpulan sebagai berikut :

1. Sistem dengan variasi *strain* 0,1 dan *stress* -0,1 diketahui memiliki struktur kristal teroptimasi yang hampir serupa dengan sistem murni. Sistem variasi *strain* 0,2 hingga 0,4 dan *stress* -0,2 hingga -0,4 menunjukkan adanya ikatan yang putus karena pemberian beban terus-menerus meskipun telah terjadi deformasi plastik sehingga pemberian variasi ini akan mengganggu kestabilan geometri dari material. Struktur kristal teroptimasi juga memberikan informasi jarak antar atom yang mana perubahan nilai jarak antar atom tersebut bergantung pada variasi *strain* dan *stress* yang diberikan.
2. Analisis struktur elektronik berupa struktur pita, rapat keadaan (DOS), dan energi celah pita menunjukkan bahwa variasi *strain* 0,1; 0,2; 0,3 dan variasi *stress* -0,1 dan -0,2 memiliki energi celah pita yang tergolong semikonduktor seperti dengan sistem murni sehingga dapat dikatakan pada variasi tersebut efektif diterapkan dalam peningkatan kemampuan fototakalisis material. Hasil berbeda ditunjukkan oleh sistem variasi *strain* 0,4 dan variasi *stress* -0,4 yang tergolong ke dalam bahan bersifat isolator sedangkan sistem variasi *stress* -0,3 tergolong ke dalam bahan

yang bersifat konduktor karena terjadi tumpang tindih (*overlap*) antara VBM dan CBM di bawah energi fermi.

5.2. Saran

Penelitian ini menunjukkan bagaimana *strain* dan *stress* mempengaruhi struktur elektronik material GeC. Pengembangan penelitian mengenai GeC dilakukan untuk memahami lebih dalam terkait struktur elektronik material ini. Salah satu pengembangan yang dapat dilakukan ialah mengkaji terkait pengaruh impuritas dan kekosongan atom (*vacancy*) terhadap struktur geometri dan struktur elektronik GeC.

DAFTAR PUSTAKA

- Abdullahi, Y. Z., dan Ersan, F. 2023. Theoretical Design of Porous Dodecagonal Germanium Carbide (d-GeC) Monolayer. *RSC Advances*, **Vol.13 No.5 Januari 2023**: 3290–94.
- Aji, W. B., dan Sutrisno, H. 2022. Modifikasi Sifat Elektronik Material Perovskit NaYTio₄ oleh Variasi Konsentrasi Dopan Lantanum dengan Metode Density Functional Theory. *ALCHEMY Jurnal Penelitian Kimia*, **Vol.18 No.1 2022**: 80-94.
- Akhadi, M. 2015. Memproduksi Bahan Semikonduktor di dalam Teras Reaktor Nuklir. *Jurnal Kajian Ilmu dan Teknologi*, **Vol.4 No.1 April 2015**: 90-97.
- Alfianto, E. 2015. Implementasi Metode Teori Fungsional Kerapatan pada bahasa C untuk menemukan energi keadaan dasar berbagai atom. *Jurnal Arus Elektro Indonesia*, **Vol. 1 No.3 Desember 2015**: 1-6.
- Argaman, N. dan Makov, G. 2000. Density Functional Theory: An introduction. *Americal Journal of Physics*, **Vol. 68 No.1 Januari 2000**: 69-79.
- Behzad, S. 2019. Direct to indirect band gap transition in two-dimensional germanium carbide through Si substitution. *Results in Physics*, **Vol.13 April 2019**: 1-8.
- Bernal, R. V. 2019. Electrical Properties of Two-Dimensional Materials Used in Gas Sensors. *Sensors*, **Vol.1295 No. Maret 2019**: 1-29.
- Ghojvand, A., Hashemifar, S. J., Ahmadpour, M. T., Shapeev, A. V., Alhaji, A., dan Hassanzada, Q. 2020. Ab initio analysis of some Ge-based 2D nanomaterials. *Journal of Applied Physics*, **Januari 2020**: 1-7.
- Guevara, U., Lopez, R., Blanco, J., dan Nunez, J. 2019. Theoretical study of electronic properties and spin density in Pt-Co alloys. *Material Research Express*, **Vol.6 No.9 Juli 2019**: 1-10.
- Guilhon, I., Marques, T. M., Pela, R. R., dan Bechstedt, F. 2015. Influence of Structure and Thermodynamic Stability on Electronic Properties of Two-Dimensional SiC, SiGe, and GeC Alloys. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, **Vol.92 No.7 2015**: 1–12.
- Hanif, M. A., Nadeem, F., Tariq, R., dan Rasyid, U. 2021. *Renewable and Alternative Energy Resources*. Academic Press.

- Hartree, D R. 1927. The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, **Vol.24 No.1 November 1927**: 89–110.
- Hidayat, N., dan Ariswan. 2022. Pengaruh Temperatur Terhadap Resistansi Bahan Konduktor Al, Cu, dan Semikonduktor Lapisan Tipis Pb (Se, Te), CdTe Hasil Preparasi dengan Teknik Evaporasi Termal. *Jurnal Ilmu Fisika dan Terapannya*, **Vol.09 No.02 Oktober 2022**: 21-31.
- Hidayati, N. 2021. *Kimia Terapan Ikatan Kimia pada Bahan*. PNJ Press.
- Hidayati, S., dan Sholihun. 2022. Strain Effects on the Band Structures of Monolayer GaN from the Density Functional Theory. *Material Science Forum*, **Vol. 1066 Juli 2022**: 144-149.
- Hu, H., Wang, Z., Zhu, J., WU, D., Liu, M., Ding, H., Liu, Z., dan Liu, F. 2011. Quantum Stress: Density Functional Theory Formulation and Physical Manifestation. *Physical Review Letter*, **Vol. 109 Desember 2011**: 1-5.
- Janczarek, M., & Kowalska, E. 2021. Defective Dopant-Free TiO₂ as an Efficient Visible Light-Active Photocatalyst. *Catalysts*, **Vol.II No.8 2021**.
- Khossossi, N., Banerjee, A., Essaoudi, I., Ainane, A., Jena, P., dan Ahuja, R. 2021. Thermodynamics and kinetics of 2D g-GeC monolayer as an anode materials for Li/Na-ion batteries. *Journal of Power Sources*, **Vol.485 Februari 2021**.
- Kittel, C. (2005). *Introduction to Solid State Physics* (Eight Edition). John Wiley & Sons, Inc.
- Kumar, A., & Pandey, G. 2017. A review on the factors affecting the photocatalytic degradation of hazardous materials. *Material Science & Engineering International Journal*, **Vol.I No.3 2017**.
- Leckie, F. A., dan Bello, D. J. D. 2009. *Strain and Stress*. Boston: Springer.
- Luo, M., dan Xu, Y. E. 2019. Tunable Band-Gap of the GeC Monolayer by Strain and Electric Field: A First-Principles Study. *Optik*, **Vol.195 Oktober 2019**.
- Mahmood, A., dan Sansores, L. E. 2005. Band Structure and Bulk Modulus Calculations of Germanium Carbide. *Journal of Materials Research*, **Vol.20 No.5 Mei 2005**: 1101–1106.

- Maslahah, U. 2015. *Analisis Lebar Celah Pita Energi dan Ikatan Molekul Lapisan Tipis a-Si:H yang Ditumbuhkan dengan Metode PECVD*. (Tugas Akhir). Program Studi Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan, Institut Teknologi Sepuluh November.
- Min, L., E, X. Y., dan Hao, S. Y. 2019. Effect of Normal Strain and External Electric Field on Electronic Properties of the GeC Bilayer: A First-Principles Study. *AIP Advances*, **Vol.9 Desember 2019**.
- Niu, X., Booher, J., dan Dalal, V. L. 2005. Nanocrystalline Germanium and Germanium Carbide Films and Devices. *Journal Materials Research Society Symposium*, **Vol.862 2005** : 151–156.
- Novoselov, K. S., Geim, A.K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V., dan Firsov, A. A. 2004. Electric Field in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, **Vol.306 Oktober 2004**: 666–69.
- Pamungkas, E. B., Prasetya, A.T., dan Alauhdin, M. 2013. Pengaruh Enkapsulasi Fe dan Cu pada BNNT terhadap Parameter NMR menggunakan DFT. *Indonesian Journal of Chemical Science*, **Vol.2 No.1 2013**: 24-28.
- Pang, C. L. 2020. Strain and stress effects on single crystal-supported titania and related nanostructures. *Semiconductor Science and Technology*, **Vol.35 No.11 2020**.
- Peng, Q., Liang, C., Ji, W., dan De, S. 2013. A First-Principles Study of The Mechanical Properties of G-Gec. *Mechanics of Materials*. **Vol.64 Mei 2013**: 135-141.
- Peng, Z., Chen, X., Fan, Y., Srolovitz, D. J., dan Lei, D. 2020. Strain Engineering of 2D Semiconductors and Graphene: From Strain Fields to Band-Structure Tuning and Photonic Applications. *Light: Science and Applications*, **Vol.9 No.190 2020** : 1-25.
- Pierson, H. O. 1999. *Handbook of Chemical Vapor Deposition: Principles, Technology, and Applications*. New York: William Andrew Publishing.
- Pramono, A. W. Dan Suryantoro, A. 2012. Overview of Density Functional Theory For Superconductors. *Majalah Metalurgi*, **Vol.27 No.2 2012**: 67-76.

- Rahman, I. A., dan Purqon, A. 2015. Studi *Density Functional Theory* (DFT) Dan Aplikasinya Pada Perhitungan Struktur Elektronik Monolayer MoS_2 . *Prosiding SKF 2015*, **Desember 2015**: 497–503.
- Sholihun. 2015. *First-principles Calculations of Vacancies in Semiconductors*. (Disertasi). Jurusan Matematika dan Fisika Sains, Kanazawa University.
- Sholl, D. S., dan Steckel, J. A. 2009. *Density Functional Theory: A Practical Introduction*. John Wiley & Sons, Inc.
- Shrestha, S, Gupta, N, Aliberti, P, dan Conibeer, G. 2012. Growth and Characterization of Germanium Carbide Films for Hot Carrier Solar Cell Absorber. *Conference Record of the IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, **2012** :2601–2604.
- Singh, S., Verma, K., dan Prakash, C. 2021. *Advanced Applications of 2D Nanostructures*. India: Materials Horizons : From Nature to Nanomaterials.
- Sousa, F.S., Fernades, P. A., dan Ramos, M. 2007. General Performance of Density Functionals. *Journal Physics Chemistry*. **Vol.111 2007**: 10439-10452.
- Tanaka. M., Ito, Y., Shirai, M., dan Iwai, S. 2015. Pressure-induced bandgap narrowing in GeC. *Nature Communications*. **Vol.6 No.8549 2015**.
- Tim Dosen Optoelektronika, Fakultas Sains, Institut Teknologi Sepuluh November. 2019. *Optoelektronika*. Surabaya: Penerbit Departemen Fisika, Fakultas Sains-ITS Surabaya.
- Turcotte, D. L. 2001. *Geodynamics 2nd edition*. Cambridge Univ Press: UK.
- Umam, K., Sholihun, Nurwantoro, P., Absor, M. A. U., Nugraheni, A. D., dan Budhi, R. H. S. 2018. Biaxial Strain Effects on the Electronic Properties of Silicene: The Density-Functional-Theory-Based Calculations. *Journal of Physics: Conference Series*, **Vol.1011 No.1 2018** : 1–5.
- Vrugt, M. T., Löwen, H., dan Wittkowski, R. 2020. Classical Dynamical Density Functional Theory: From Fundamentals to Applications. *Advances in Physics*, **Vol.69 No.2 2020**: 121–247.
- Vu, T. V., Anh, N. T. T., Hoat, D.M., Tran, D. P., Tong, H. D., Luong, H. L., Hieu, L. M., Nguyen, C. V., Phuc, H. V., Binh, N. T. T., dan Hieu, N. N. 2019. Electronic, Optical and Photocatalytic Properties of Fully Hydrogenated GeC Monolayer.

Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures, **Vol.117 November 2019** : 1-18.

Wahyuni, N., Manrulu, R. H., dan Ramli, I. 2022. Studi Sifat Elektronik Pyrochlore $Nd_2Ir_2O_7$ Menggunakan DFT. *Jurnal Ilmu dan Inovasi Fisika*, **Vol.06 No.01 2022**: 61-71.

Wong, J.H., Wu, B.R, dan Lin, M. F. 2012. Strain Effect on the Electronic Properties of Single Layer and Bilayer Graphene. *Journal of Physical Chemistry*, **Vol.116 No.14 2012** : 8271–77.

Wulandari, A. I., Alamsyah, dan Agusty, C. L. 2021. Analisis Tegangan Regangan Pada Pelat Deck Dan Bottom Kapal Ferry Ro-Ro Menggunakan Finite Element Method. *Wave: Jurnal Ilmiah Teknologi Maritim*, **Vol.15 No.1 Juli 2021**: 45–52.

Xu, Z., Li, Y., Li, C., dan Liu, Z. 2016. Tunable electronic and optical behaviors of two-dimensional germanium carbide. *Applied Surface Science*. **Januari 2016** : 1-34.

Zhang, L, dan Cui, Z. 2022. Theoretical Study on Electronic, Magnetic and Optical Properties of Non-Metal Atoms Adsorbed onto Germanium Carbide. *Nanomaterials*, **Vol.12 No.10 Mei 2022**: 1-12.

Zhao, F., Chen, X., Yi, Z., Qin, F., Tang, Y., Yao, W., Zhou, Z., dan Yi, Y. 2020. Study on the Solar Energy Absorption of Hybrid Solar Cells with Trapezoid-Pyramidal Structure Based PEDOT:PSS/c-Ge. *Solar Energy*, **Vol.204 Februari 2020** : 635–643.