Title	**First-Principles Study of the Structural Properties of Strain-Engineered Monolayer GeC Using Quantum ESPRESSO**
Supervisor	Dr. Safia Alharbi
Students	Shatha Awadh
Abstract	Two-dimensional (2D) materials continue to attract significant interest due to their tunable structural and electronic properties. In this work, first-principles calculations based on Density Functional Theory (DFT), as implemented in the Quantum ESPRESSO package, were employed to investigate the structural properties of monolayer Germanium Carbide (GeC) under biaxial strain. A comprehensive set of convergence tests for k-point sampling and plane-wave cutoff energies was first performed to ensure numerical accuracy. The pristine monolayer GeC was then fully optimized, yielding a planar honeycomb geometry with an equilibrium lattice constant of approximately 3.27 Å and a Ge–C bond length of 1.89 Å, in close agreement with previous theoretical studies. Biaxial strain ranging from −7% (compressive) to +7% (tensile) was applied to study structural responses. The total-energy profile exhibited a characteristic parabolic dependence on strain, with the minimum located at the unstrained configuration, confirming that the relaxed monolayer represents the most stable structure. Tensile strain caused systematic elongation of Ge–C bonds and a gradual increase in total energy, while compressive strain resulted in bond shortening and enhanced repulsive interactions, also increasing the system energy. No buckling or symmetry breaking was observed across the strain range, indicating strong elastic stability. Overall, the results demonstrate that monolayer GeC is a robust 2D material with predictable and tunable structural behavior under moderate biaxial strain. These findings provide a solid theoretical foundation for future research on GeC-based flexible nano-electronic and optoelectronic devices.

الملخص باللغة العربية	لا تزال المواد ثنائية الأبعاد (2D) تجذب اهتمامًا كبيرًا نظرًا لخصائصها البنيوية والإلكترونية القابلة للضبط. في هذا العمل، استُخدمت حسابات المبادئ الأولية المستندة إلى نظرية الكثافة الوظيفية(DFT) ، كما طُبّقت في حزمة Quantum ESPRESSO، لدراسة الخصائص البنيوية لكربيد الجرمانيوم أحادي الطبقة (GeC) تحت تأثير إجهاد ثنائي المحور. أُجريت أولًا مجموعة شاملة من اختبارات التقارب لعينات نقطة k وطاقات قطع الموجة المستوية لضمان الدقة العددية. ثم حُسِّنت طبقة GeCأحادية الطبقة الأصلية بالكامل، مما أسفر عن هندسة قرص العسل المستوية بثابت شبكة متوازن يبلغ حوالي 3.27 Å وطول رابطة Ge–C يبلغ 1.89Å ، وهو ما يتفق تمامًا مع الدراسات النظرية السابقة. طُبِّق إجهاد ثنائي المحور يتراوح من -7% (انضغاط) إلى +7% (شد) لدراسة الاستجابات البنيوية. أظهر نمط الطاقة الكلية اعتمادًا مكافئًا مميزًا على الاجهاد، مع وجود الحد الأدنى في التكوين غير المجهد، مما يؤكد أن الطبقة الأحادية المريحة تُمثل البنية الأكثر استقرارًا. تسبب اجهاد الشد في استطالة منتظمة لروابط Ge-C وزيادة تدريجية في الطاقة الكلية، بينما أدى الجهد الانضغاطي إلى تقصير الروابط وتعزيز التفاعلات التنافرية، مما أدى أيضًا إلى زيادة طاقة النظام. لم يُلاحظ أي انبعاج أو كسر في التناظر عبر نطاق االجهد، مما يدل على استقرار مرن قوي. بشكل عام، تُظهر النتائج أن GeC أحادي الطبقة مادة متينة ثنائية الأبعاد ذات سلوك هيكلي يمكن التنبؤ به وقابل للضبط تحت اجهاد ثنائي المحور معتدل. توفر هذه النتائج أساسًا نظريًا متينًا للأبحاث المستقبلية حول الأجهزة النانوية الإلكترونية المرنة والأجهزة البصرية الإلكترونية القائمة على.GeC