

Studi teoritik pembentukan celah energi pada graphene yang didop = Theoretical study on the formation of energy gap on doped graphene

Syahril, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20309111&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Skripsi ini berisi studi teoritik tentang pembentukan celah energi pada graphene yang didop dengan atom-atom dari golongan III-A dan V-A. Hamiltonian model terdiri atas suku kinetik yang diturunkan dari pendekatan tight-binding, suku potensial elektrostatik akibat muatan ekstra inti-inti atom impuritas, serta interaksi magnetik Double-Exchange antara spin-spin elektron konduksi dengan momen-momen magnetik lokal atom-atom impuritas. Model ini diselesaikan dengan metode Dynamical Mean Field Theory. Pada studi ini ditinjau dua kasus dengan asumsi-asumsi berikut: Pertama, seluruh elektron atau hole dari atom-atom impuritas terdelokalisasi sehingga tidak membentuk momen-momen magnetik lokal dan interaksi magnetik tidak terjadi; Kedua, seluruh elektron atau hole dari atom-atom impuritas terlokalisasi dan membentuk momen-momen magnetik lokal yang berlaku sebagai penghambur magnetik. Momen-momen magnetik lokal pada sublattice A dan B dianggap membentuk konfigurasi antiferromagnetik. Hasil-hasil perhitungan kami menunjukkan bahwa potensial non-magnetik tidak membentuk celah energi, tetapi hanya menghasilkan pergeseran potensial kimia sehingga mengubah sistem dari semi-metal menjadi metal. Di lain pihak, potensial magnetik dengan konfigurasi antiferromagnetik dapat membentuk celah energi dengan posisi potensial kimia di dalam celah energi sehingga sistem menjadi insulator. Lebar celah energi ini meningkat dengan bertambahnya konsentrasi impuritas. Lebih lanjut, hasil perhitungan konduktivitas optik graphene yang didop dengan potensial magnetik menyarankan bahwa iluminasi foton dengan energi sedikit di atas nilai lebar celah energi dapat mengubah sifat listrik sistem dari keadaan insulator menjadi keadaan dengan konduktivitas sedikit lebih baik dari graphene murni.

<hr>

ABSTRACT

This bachelor thesis comprehends a study on the formation of energy gap in graphene doped with atoms from groups III-A and V-A. The model Hamiltonian consists of a kinetic term derived from the tight-binding approximation, an electrostatic potential arising from the extra charges of the impurity nuclei, and the Double-Exchange term arising from the magnetic interactions between spins of the conduction electrons and spins of the local magnetic moments of the impurity atom. The model is solved using the method of Dynamical Mean Field Theory. In this study two cases are considered with the following assumptions: First, all the electrons or holes of the impurity atoms are delocalized, hence local magnetic moments are not formed, thus the magnetic interactions do not occur;

Second, all the electrons or holes of the impurity atoms are localized, forming local magnetic moments that act as magnetic scatterers. The local magnetic moments of sublattices A and B are assumed to be in antiferromagnetic configuration. Our calculation results show that the nonmagnetic potential does not cause formation of energy gap, but only shifts the chemical potential such that the system turns from a semi-metal into a metal. On the other hand, the magnetic potential with antiferromagnetic configuration can result in formation of energy gap, with the chemical potential lying inside it, making the system turn into an insulator. The energy gap width increases as the impurity concentration increases. Further, our calculated optical conductivities of the doped graphene with magnetic potential suggest that photon illumination at energy slightly greater than the energy gap can change the electric property of the system from an insulating state to a state with conductivity slightly better than that of a pure graphene.