

INTISARI

Peningkatan Sifat Termoelektrik Material *Graphene* Melalui Modifikasi Pembawa Muatan (Kajian Komputasional dan Eksperimental)

Oleh

Dwi Nugraheni Rositawati

19/450282/SPA/00664

Graphene terdoping N dan Au secara interstisial telah menunjukkan kinerja termoelektrik yang baik. Modifikasi pembawa muatan memainkan peran penting dalam menentukan sifat termoelektrik material *graphene*. Penelitian ini mengkaji penentuan tipe pembawa muatan serta sifat termoelektrik material *graphene* terdoping N dan Au berdasarkan kajian komputasional dan eksperimental. Kajian komputasional untuk mengetahui struktur dan sifat elektronik dilakukan berdasarkan teori *Density Functional Theory* (DFT) dengan menggunakan *software* OpenMX, sedangkan penentuan sifat termoelektrik dilakukan berdasarkan teori Boltzmann semi-klasik dengan menggunakan *software* BoltzTraP pada rentang suhu 200K s/d 700K. Kajian eksperimental untuk menentukan sifat termoelektrik dilakukan dengan menggunakan alat LSR-4. Hasil kajian komputasional menunjukkan bahwa *graphene* terdoping N ataupun Au memiliki karakter pembawa muatan tipe-p. Koefisien Seebeck (S) *graphene* terdoping 6,25% N dan 50% N mengalami peningkatan 3 dan 5,5 kali lebih tinggi dibandingkan dengan *graphene* murni. Nilai *figure of merit* ZT *graphene* terdoping N juga mengalami peningkatan dibandingkan dengan *graphene* murni yaitu meningkat menjadi 0,98 dan 1,00 untuk konsentrasi N sebesar 6,25% dan 50% dibandingkan nilai ZT *graphene* murni yaitu 0,81. Hasil kajian komputasional ini sesuai dengan hasil kajian eksperimental yang menunjukkan bahwa peningkatan konsentrasi doping N ataupun doping Au juga mengakibatkan terjadinya peningkatan koefisien Seebeck dan PF pada seluruh rentang suhu. Hal ini disebabkan karena kehadiran doping telah meningkatkan konsentrasi pembawa muatan dan meningkatkan degenerasi pita untuk meningkatkan massa efektif pembawa muatan di sekitar tingkat Fermi yang berkontribusi pada proses konduksi. Kajian komputasional dan eksperimental ini menunjukkan bahwa *graphene* terdoping N dan Au memiliki potensi yang menjanjikan untuk aplikasi termoelektrik dan memberikan wawasan tentang fisika yang mendasari tentang pengaturan sifat termoelektrik material *graphene* terdoping.

Kata kunci: *graphene*, doping interstisial, *DFT*, teori Boltzmann semi-klasik, sifat elektronik, sifat termoelektrik.

ABSTRACT

Enhancement of The Thermoelectric Properties of Graphene Material by Charge Carrier Modification (Computational and Experimental Study)

by

Dwi Nugraheni Rositawati
19/450282/SPA/00664

Interstitally N- and Au-doped graphene has shown good thermoelectric performance. Charge carrier modification plays an important role in determining the thermoelectric properties of graphene materials. This study examines the determination of charge carrier type and thermoelectric properties of N and Au doped graphene materials based on computational and experimental studies. Computational studies to determine the structure and electronic properties are based on Density Functional Theory (DFT) using OpenMX software, while the determination of thermoelectric properties is based on semi-classical Boltzmann theory using BoltzTraP software with temperature setting of 200K to 700K. Experimental studies to determine thermoelectric properties were carried out using the LSR-4 tool. The results of computational studies show that N or Au doped graphene has a p-type charge carrier character. The Seebeck coefficient (S) of 6.25% N and 50% N doped graphene increased 3 and 5.5 times higher than that of pure graphene. The figure of merit ZT value of N-doped graphene also increases compared to pristine graphene, which increased to 0.98 and 1.00 for N concentrations of 6.25% and 50% compared to the ZT value of pristine graphene which is 0.81. The results of this computational study are in accordance with the results of experimental studies which show that the increasing in N doping or Au doping concentration also results in an increasing in the Seebeck coefficient and PF over the entire temperature range. This is because the presence of doping has increased the concentration of charge carriers and enhanced band degeneracy to increase the effective mass of charge carriers around the Fermi level which contributes to the conduction process. This computational and experimental study shows that N- and Au-doped graphene has promising potential for thermoelectric applications and provides insight into the underlying physics of the determination of thermoelectric properties of doped graphene materials.

Keywords: *graphene, interstitial doping, DFT, semi-classical Boltzmann theory, electronic properties, thermoelectric properties.*