

INTISARI

KAJIAN KOMPUTASI SUMBANGAN STRUKTUR ELEKTRONIK PADA SUPERKONDUKTIVITAS BILAYER GRAPHENE TERDOPING KALSIUM MENGGUNAKAN DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Oleh

Sri Hidayati

18/433758/PPA/05573

Graphene merupakan material 2 dimensi yang memiliki struktur elektronik, mekanik, termal dan sifat lainnya yang luar biasa. Oleh karena itu, *graphene* banyak dikaji struktur elektronik maupun sifat konduktivitasnya. Penelitian ini mengkaji sumbangan struktur elektronik pada superkonduktivitas *bilayer graphene* terdoping kalsium menggunakan pendekatan *Density Functional Theory*. Doping kalsium diletakkan di antara dua layer *graphene* (sistem A) dan di atas permukaan *bilayer graphene* (sistem B). Perhitungan dilakukan dengan menggunakan model supersel 4×4 dengan konsentrasi atom kalsium 1.52%, 3.12% dan 6.25%. Hasil perhitungan menunjukkan bahwa terjadi pergeseran pita energi di bawah level Fermi akibat doping tipe-n baik pada sistem A maupun sistem B, sehingga menyebabkan kedua sistem bersifat metal. Akibat doping kalsium menyebabkan energi Fermi di kedua sistem meningkat seiring dengan bertambahnya doping. Kemudian ditemukan bahwa sistem A menghasilkan transfer elektron tertinggi adalah $0.06 e^-$ dan sistem B $0.0087 e^-$. Temperatur kritis (T_c) tertinggi adalah 1.37 K untuk sistem A dan 7.9 K untuk sistem B. Kompensasi (*trade off*) doping maksimum yang bisa diberikan pada kedua sistem adalah 6.25%.

Kata-kata kunci : bilayer graphene, DFT, superkonduktivitas, temperatur kritis, transfer elektron.

ABSTRACT

Computational Study of Electronic Structure Contribution on Superconductivity of Ca-intercalated Bilayer Graphene using Density Functional Theory

By

Sri Hidayati

18/433758/PPA/05573

Graphene is a two-dimensional material which has electronic structure, mechanical, thermal and other outstanding properties. Therefore, graphene has been studied both electronic structure and its superconductivity. This research investigated the electronic structures contribution of superconductivity Ca-intercalated bilayer graphene using Density Functional Theory (DFT). Calcium atom is positioned both in the middle of bilayer graphene (A system) and on the top surface of bilayer graphene (B system). The Calculation was performed using the supercell model 4×4 with Ca-doped concentration 1.56%, 3.12% and 6.25%. The resulted calculation shown that those band structures shifted below Fermi level, hence semimetal graphene being metal because n-type doping. The Fermi energy both of systems have an increase gradually. Then, it is intriguing that A system exhibits the highest electron transfer $0.06 e^-$ and B system is $0.0087 e^-$. The highest critical temperature is 1.37K for A system and 7.9K of B system. The maximum trade off of adatom both of systems is 6.25%.

Keywords :bilayer graphene, DFT, superconductivity, critical teperature, electron transfer