

INTISARI

KAJIAN PENGARUH OKSIGEN PADA SIFAT ELEKTRONIK SISTEM *GRAPHENE MONO* DAN *BILAYER* DENGAN PENDEKATAN *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

Oleh

MUHAMMAD YUSRUL HANNA

13/347585/PA/15318

Oksidasi selama proses pembuatan suatu sistem dua dimensi (2D) yang berbasis karbon (*graphene*) tidak bisa dihindari sehingga nantinya akan mempengaruhi struktur elektronik sistem tersebut. Pada penelitian ini, telah dilakukan kajian pengaruh oksigen pada sifat elektronik sistem *graphene mono* dan *bilayer* menggunakan pendekatan komputasional yang realistis berbasis pada metode *density functional theory* (DFT). Perhitungan dilakukan dengan menggunakan model supersel 3×3 yang sudah divalidasi dengan perhitungan supersel 1×1 . Hasil perhitungan menunjukkan bahwa pada kasus *graphene monolayer* yang ditambah dengan atom oksigen konsentrasi 6%, 11%, 17%, 33% dan 50% menghasilkan celah tenaga yang meningkat dari 0.1 menjadi 2.48 eV. Sementara itu, pada kasus *graphene bilayer* diperoleh juga celah tenaga yang meningkat dari 0.1 menjadi 2.42 eV terhadap penambahan konsentrasi. Pada sistem *graphene bilayer* konsentrasi 33% muncul keadaan meta stabil pada struktur tersebut sehingga memunculkan sifat logam pada sifat elektronik dan juga muncul watak seperti jenis-*n* (*n-type like*) pada konfigurasi 4 – 8 (Konfigurasi 4 – 8. 4 atom oksigen di atas dan 8 atom oksigen di bawah permukaan *graphene bilayer*) sedangkan pada konfigurasi 8 – 4 muncul sifat logam dan watak seperti jenis-*n* (*n-type like*) dengan pembawa muatan dominan adalah elektron. Penambahan dan konfigurasi atom oksigen sangat sensitif terhadap perubahan sifat elektronik sistem *graphene mono* dan *bilayer*.

Kata-kata kunci : *Graphene mono* dan *bilayer*, oksigen, supersel, Jenis-*n*, logam, semikonduktor

ABSTRACT

STUDY OF OXYGEN EFFECT ON THE ELECTRONIC PROPERTIES OF MONO AND BILAYER GRAPHENE USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY APPROXIMATION

By

MUHAMMAD YUSRUL HANNA

13/347585/PA/15318

Oxidation during the fabrication process of a two-dimensional carbon-based systems (graphene) can not be avoided so that will be affect the electronic structure of the systems. In this study, has conducted studies the oxygen effect on the electronic properties of mono and bilayer graphene systems using computational realistic approach based on density functional theory (DFT). Calculation were performed using the supercell model 3×3 which is validated by calculation supercell 1×1 . The calculation show that in the case of monolayer graphene that is added with concentration of oxygen atoms 6%, 11%, 17%, 33% and 50% generate energy gap increased from 0.1 to 2.48 eV. Meanwhile, in the case of bilayer graphene obtained energy gap also increased from 0.1 to 2.42 eV. Interestingly in bilayer graphene system with 33% concentration emerging meta-stable state on the structure giving rise to metallic properties on the electronic structure and also appear as an *n*-type like on the 4 – 8 configuration (4 – 8 configuration. 4 oxygen atoms in above and 8 oxygen atoms below the bilayer bilayer graphene) whereas at 8 – 4 configuration also appear metallic properties and the *n*-type with the dominant charge carriers are electrons. The addition and configuration of the oxygen atoms are highly sensitive to changes in the electronic properties of monolayer and bilayer graphene systems

Keywords : mono and bilayer graphene, oxygen, supercell, *n*-type, metallic, semiconductor