

Density functional theory study of hydrogenated graphene = Density functional theory study of hydrogenated graphene

Gagus Ketut Sunnardianto, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20300669&lokasi=lokal>

Abstrak

Grafena telah diperkirakan memiliki banyak aplikasi karena sifatnya yang unik yang timbul dari dispersi energi linier di sekitar energi Fermi. Meskipun demikian, tidak adanya celah pita membuat grafena tidak dapat berfungsi dengan baik sebagai alat semikonduktor yang merupakan kendala untuk aplikasi elektronik. Oleh karena itu, banyak cara telah diusulkan untuk membuka celah pita pada grafena yaitu penemuan baru dari lembaran grafena yang terhidrogenasi menunjukkan cara yang relatif mudah untuk membuka sebuah celah energi pada grafena. Dalam studi ini, kita mensimulasikan struktur elektronik dari grafena yang terhidrogenasi dalam teori fungsional kerapatan untuk 10 nilai konsentrasi hidrogen.

Hasil kami menunjukkan bahwa, grafena menyerap hidrogen dari konsentrasi yang sangat rendah sampai sekitar 96% konsentrasi hidrogen, nilai rapat keadaan di energi Fermi berubah dari nol ke nilai tertentu menimbulkan sifat logam pada grafena terhidrogenasi. Namun, ketika konsentrasi hidrogen mendekati penuh yaitu ketika lebih dari 96% konsentrasi hidrogen, grafena terhidrogenasi mulai terbentuk celah energi kecil, sehingga berubah menjadi semikonduktor.

.....Graphene has been predicted to possess many applications because of its unique properties arising from its linear energy dispersion around its Fermi energy. Despite this, the absence of band gap which makes graphene unable to function as a semiconductor is a thrill feature for the application to solid state electronic devices. Therefore, many scenarios have been proposed to form a band gap in graphene. Among these, a recent discovery of a hydrogenated graphene sheet suggests a relatively easy way to form an energy gap in graphene. In this study, we have simulated the electronic structure of hydrogenated graphene within the framework of density functional theory for 10 different values of hydrogen concentration.

Our results show that, as graphene adsorbs hydrogens from very low concentration up to around 96% of hydrogen coverage, the value of density of states at Fermi energy changes from zero to a finite value, giving rise to a metallic character in the hydrogenated graphene. However, as the hydrogen concentration approaches a full coverage, i.e. when more than 96% of carbon atoms are covered by hydrogens, the hydrogenated graphene starts to form a small energy gap, making it turns into a semiconductor.