

Studi teoritik pengaruh substrat terhadap konduktivitas optik graphene = Theoretical study on the effects of substrate on the optical conductivity of graphene / Wileam Yonatan Phan

Wileam Yonatan Phan, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20414017&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Graphene adalah suatu material ajaib dengan banyak aplikasi yang menjanjikan sebagai devais, di mana graphene harus digabungkan dengan bahanbahan lain, terkhusus dengan cara ditaruh di atas substrat. Riset baru-baru ini menunjukkan bahwa sifat-sifat sis graphene dapat mengalami perubahan, tergantung dari jenis substrat yang digunakan. Dalam skripsi ini, kami mengusulkan suatu model sederhana untuk sistem graphene di atas substrat berdasarkan metode tight-binding, di mana kami memasukkan suku hibridisasi pada orbital 2pz graphene dengan orbital-orbital pada substrat. Hamiltonian yang terbentuk kemudian diubah ke dalam bentuk matriks dan dihitung dengan rumus-rumus yang dikembangkan dari formalisme fungsi Green dan teori respon linier Kubo untuk menghasilkan rapat keadaan DOS(ω) dan bagian riil dari tensor konduktivitas optik $\sigma_1^{ab}(\omega)$. Hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa hibridisasi dengan substrat cenderung menghasilkan keadaan di sekitar energi Fermi, sehingga meningkatkan konduktivitas DC, terutama ketika substratnya bersifat metalik atau insulator dengan celah energi sempit. Lebih lanjut, puncak pada $\sigma_1^{ab}(\omega)$ cenderung mengalami renormalisasi dan redshift ketika substratnya adalah insulator dengan nilai celah energi sekitar dua kali lipat dari hopping parameter tetangga terdekat pada graphene. Sementara itu, substrat dengan nilai celah energi yang sangat lebar cenderung tidak mempengaruhi baik DOS(ω) maupun $\sigma_1^{ab}(\omega)$ dari graphene. Peningkatan jumlah lapisan substrat cenderung memperhalus struktur yang terjadi pada DOS(ω) dan $\sigma_1^{ab}(\omega)$ dari graphene.

<hr>

ABSTRACT

Graphene is a wonder material with a lot of promising applications as devices, in which it must be combined with other materials, most notably put on top of a substrate. Recent research has shown that the physical properties of graphene can change depending on the type of the substrate employed. In this thesis, we propose a simple model describing the graphene-on-substrate system based on the tight binding approximation, where we introduce a hybridization term of the graphene 2pz orbital and topmost substrate layer orbitals. The resulting Hamiltonian is then converted into matrix form and calculated using formulae based on Green function's formalism and Kubo linear response theory to yield the density of states DOS(ω) and real part of the optical conductivity tensor $\sigma_1^{ab}(\omega)$ of the graphene layer. The results show that hybridization with the substrate tends to create states around the Fermi energy, thus enhancing the DC conductivity, especially when the substrate is metallic or insulating with low energy gap. Furthermore, the peak in $\sigma_1^{ab}(\omega)$ tends to get renormalized and experience a redshift when the substrate is an insulator with a energy gap value around twice the graphene nearest-neighbor hopping parameter. Meanwhile, an insulating substrate with a very high band gap tends not to affect both DOS(ω) and $\sigma_1^{ab}(\omega)$ of graphene. Increasing the number of substrate layers tends to smoothen the structure

present in the $\text{DOS}(\omega)$ and $\sigma_1^{\text{ab}}(\omega)$ of graphene.