

MẬT ĐỘ TRẠNG THÁI ĐIỆN TỬ TRONG GRAPHENE HAI LỚP BỊ HYDRO HÓA DƯỚI ẢNH HƯỞNG CỦA ĐIỆN TRƯỜNG KHÔNG ĐỔI

BÙI DÌNH HỢI¹, ĐỖ LINH THẮNG¹

PHAN VĂN NHÂM²

¹*Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế*

²*Viện Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ cao, Trường Đại học Duy Tân*

Tóm tắt: Trong công trình này, chúng tôi khảo sát mật độ trạng thái điện tử (DOS) trong graphene hai lớp bị hydro hóa (H-BLG) đặt trong điện trường không đổi vuông góc. Bốn kiểu hydro hóa khác nhau được xem xét đó là: kiểu bàn (TL-H-BLG), kiểu ghế tựa (CL-H-BLG), kiểu bàn thu gọn (rTL-H-BLG) và kiểu ghế tựa thu gọn (rCL-H-BLG). Biểu thức của DOS được thu nhận thông qua mối liên hệ với hàm Green, sử dụng Hamiltonian trong gần đúng liên kết mạnh. Các kết quả tính toán chỉ ra rằng, graphene hai lớp thuần khiết (chưa bị hydro hóa) là bán kim loại, trong khi đó CL-H-BLG và TL-H-BLG là các bán dẫn. Bên cạnh đó, điện trường ngoài ảnh hưởng mạnh lên DOS. Trong tất cả các cấu trúc, DOS tại vị trí mức năng lượng Fermi tăng khi cường độ điện trường tăng. Ngoài ra, độ rộng vùng cấm trong các cấu trúc CL-H-BLG và TL-H-BLG giảm theo cường độ điện trường. Các đặc điểm trên là cơ sở cho việc sử dụng điện trường để điều chỉnh tính chất điện tử của H-BLG sao cho phù hợp với các ứng dụng trong các thiết bị quang-điện tử nano.

Từ khóa: graphene hai lớp; hydro hóa; mật độ trạng thái; mô hình liên kết mạnh.

1 GIỚI THIỆU

Với cấu trúc đơn lớp dạng lục giác của các nguyên tử carbon, graphene là vật liệu có cấu trúc và tính chất vật lý đặc biệt nhất hiện nay. Tuy nhiên, graphene thuần khiết có nhược điểm là độ rộng vùng cấm bằng không, nên không thể áp dụng trong các thiết bị đóng-mở (chẳng hạn như transistor hiệu ứng trường), các thiết bị quang điện tử [1]. Để khắc phục nhược điểm đó, các nhà khoa học đã và đang tìm ra các phương pháp để tạo ra và điều chỉnh độ rộng vùng cấm của graphene mà vẫn duy trì được các tính năng ưu việt của nó. Có thể kể đến một số cách như: đặt tấm graphene lên đế phân cực [2, 3], áp điện trường lên graphene hai lớp [4, 5], gây biến dạng đơn trục [6, 7], cắt tấm graphene thành các dải nano (nanoribbon) [8, 9], tác động hóa học [10]. Mục đích của các phương pháp trên là phá vỡ tính đối xứng điện tử-lỗ trống trong cấu trúc vùng năng lượng của graphene và tạo

ra vùng cấm khác không. Tuy nhiên cũng cần lưu ý rằng mọi phương pháp chỉ có ý nghĩa khi nó không phá vỡ cấu trúc của graphene và vẫn giữ được các đặc tính cơ bản của nó.

Hiện nay, vật liệu carbon hydro hóa thực sự hấp dẫn các nhà nghiên cứu do các tính chất mới mẻ, hứa hẹn nhiều ứng dụng đằng sau nó. Graphene bị hydro hóa sở hữu một số đặc tính điện tử mới so với graphene thuần khiết, làm cho vật liệu này trở thành ứng viên tiềm năng trong các thiết bị logic có vùng cấm khác 0, được quan tâm cả về mặt lý thuyết và thực nghiệm [11, 12, 13]. Một trong những yếu tố quan trọng quyết định đến tính chất điện tử của graphene bị hydro hóa là kiểu hydro hóa. Hydro hóa hoàn toàn graphene cho ta các tính chất khác với hydro hóa một nửa. Mục tiêu chính của quá trình này là phá vỡ lai hóa sp^2 để tạo thành các lai hóa sp^3 tương tự lai hóa của kim cương.

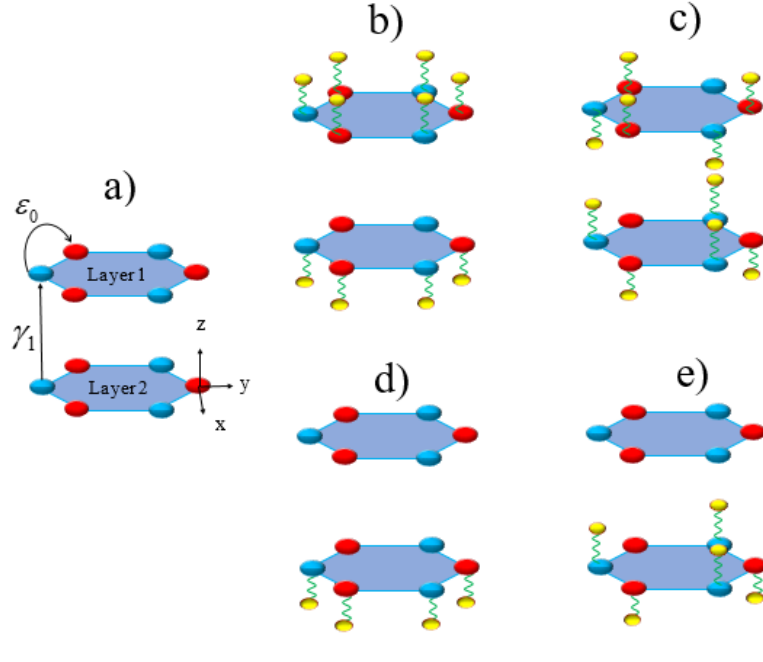
Bên cạnh đó, việc điều chỉnh độ rộng vùng cấm và các tính chất điện tử trong graphene hai lớp dễ dàng hơn graphene đơn lớp [14]. Các nhà nghiên cứu đã chỉ ra rằng các tính chất của graphene nhiều lớp bị hydro hóa phụ thuộc mạnh vào số lớp [15]. Cách xếp chồng các lớp cũng rất quan trọng. Hai lớp graphene có các kiểu xếp chồng khác nhau bao gồm: xếp chồng chéo (kiểu AB), xếp chồng thẳng (kiểu AA), xếp chồng dạng xoắn (twisted) [16, 17].

Trong công trình này, chúng tôi nghiên cứu ảnh hưởng của một điện trường vuông góc lên tính chất điện tử của H-BLG. Đại lượng đặc trưng cho tính chất điện tử là mật độ trạng thái điện tử (DOS) được tính toán bằng phương pháp hàm Green sử dụng Hamiltonian trong gần đúng liên kết mạnh. Chúng tôi quan tâm đến kiểu xếp chồng AA của graphene hai lớp vì những nghiên cứu về cấu trúc này vẫn còn khá ít. Trong trường hợp xếp chồng AA, các nguyên tử carbon trong lớp thứ nhất nằm thẳng góc với các nguyên tử carbon (trong cùng mạng con) của lớp thứ hai. Bài báo được cấu trúc như sau. Trong mục 2, chúng tôi trình bày mô hình tính toán và các công thức cơ bản. Mục 3 giới thiệu các kết quả tính toán số và thảo luận. Một số kết luận quan trọng về kết quả nghiên cứu sẽ được trình bày ở mục 4.

2 MÔ HÌNH TÍNH TOÁN VÀ CÁC CÔNG THỨC CƠ BẢN

Xét cấu trúc H-BLG xếp chồng kiểu AA. Tùy theo cách sắp xếp của các nguyên tử H trong mạng graphene hai lớp, chúng tôi xét bốn kiểu hydro hóa khác nhau, được chỉ ra trên Hình 1: kiểu bàn (TL-H-BLG), kiểu ghế tựa (CL-H-BLG), kiểu bàn thu gọn (rTL-H-BLG) và kiểu ghế tựa thu gọn (rCL-H-BLG). Đặt một điện trường không đổi vuông góc với mặt phẳng của tấm H-BLG, trạng thái của các fermion Dirac có thể được mô tả bởi Hamiltonian trong gần đúng liên kết mạnh như sau:

$$\hat{H}_{HBLG} = \begin{pmatrix} \hat{H}_{A_1A_1} & \hat{H}_{A_1B_1} & \hat{H}_{A_1A_2} & \hat{H}_{A_1B_2} & \hat{H}_{A_1H_1} & \hat{H}_{A_1H_2} \\ \hat{H}_{B_1A_1} & \hat{H}_{B_1B_1} & \hat{H}_{B_1A_2} & \hat{H}_{B_1B_2} & \hat{H}_{B_1H_1} & \hat{H}_{B_1H_2} \\ \hat{H}_{A_2A_1} & \hat{H}_{A_2B_1} & \hat{H}_{A_2A_2} & \hat{H}_{A_2B_2} & \hat{H}_{A_2H_1} & \hat{H}_{A_2H_2} \\ \hat{H}_{B_2A_1} & \hat{H}_{B_2B_1} & \hat{H}_{B_2A_2} & \hat{H}_{B_2B_2} & \hat{H}_{B_2H_1} & \hat{H}_{B_2H_2} \\ \hat{H}_{H_1A_1} & \hat{H}_{H_1B_1} & \hat{H}_{H_1A_2} & \hat{H}_{H_1B_2} & \hat{H}_{H_1H_1} & \hat{H}_{H_1H_2} \\ \hat{H}_{H_2A_1} & \hat{H}_{H_2B_1} & \hat{H}_{H_2A_2} & \hat{H}_{H_2B_2} & \hat{H}_{H_2H_1} & \hat{H}_{H_2H_2} \end{pmatrix}, \quad (1)$$



Hình 1: Graphene hai lớp xếp chồng kiểu AA: (a) dạng thuần khiết; (b) hydro hóa kiểu bàn (TL-H-BLG); (c) hydro hóa kiểu ghé tựa (CL-H-BLG); (d) hydro hóa kiểu bàn thu gọn (rTL-H-BLG); (e) hydro hóa kiểu ghé tựa thu gọn (rCL-H-BLG).

hoặc có thể viết gọn như sau:

$$\hat{H}_{HBLG}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \hat{H}_{11}(\vec{k}) & \hat{H}_{12}(\vec{k}) & \hat{H}_{13}(\vec{k}) \\ \hat{H}_{12}^\dagger(\vec{k}) & \hat{H}_{22}(\vec{k}) & \hat{H}_{23}(\vec{k}) \\ \hat{H}_{13}^\dagger(\vec{k}) & \hat{H}_{23}^\dagger(\vec{k}) & \hat{H}_{33}(\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (2)$$

trong đó, thành phần $\hat{H}_{11}(\vec{k})$ và $\hat{H}_{22}(\vec{k})$ là Hamiltonian mô tả liên kết của các nguyên tử C trong mỗi lớp, được cho bởi:

$$\hat{H}_{11}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \hat{H}_{A_1A_1} & \hat{H}_{A_1B_1} \\ \hat{H}_{B_1A_1} & \hat{H}_{B_1B_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -V & \varepsilon_0 g(\vec{k}) \\ \varepsilon_0 g(\vec{k})^* & -V \end{pmatrix}, \quad (3)$$

$$\hat{H}_{22}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \hat{H}_{A_2A_2} & \hat{H}_{A_2B_2} \\ \hat{H}_{B_2A_2} & \hat{H}_{B_2B_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V & \varepsilon_0 g(\vec{k}) \\ \varepsilon_0 g(\vec{k})^* & V \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Ở đây, $g(\vec{k}) = 2 \cos(\frac{\sqrt{3}}{2} k_x a) e^{-ik_y a/2} + e^{ik_y a}$ và $\varepsilon_0 \approx 3$ eV và $a = 1,42$ Å và V là thế năng của điện tử trong điện trường ngoài. Thành phần $\hat{H}_{12}(\vec{k})$ là Hamiltonian mô tả liên kết của các nguyên tử C giữa các lớp được cho bởi:

$$\hat{H}_{12}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \hat{H}_{A_1A_2} & \hat{H}_{A_1B_2} \\ \hat{H}_{B_1A_2} & \hat{H}_{B_1B_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 \\ 0 & \gamma_1 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

với $\gamma_1 \approx 0,2$ eV. Các hằng số trong công trình này được cho bởi các công trình [18, 19, 20]. Thành phần $\hat{H}_{13}(\vec{k})$ và $\hat{H}_{23}(\vec{k})$ là Hamiltonian mô tả tương tác giữa các nguyên tử H và C và phụ thuộc mạnh vào loại hydro hóa:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{13}^{TL} &= \begin{pmatrix} -t_1 & 0 \\ -t_1 & 0 \end{pmatrix}; \hat{H}_{23}^{TL} = \begin{pmatrix} 0 & t_2 \\ 0 & t_2 \end{pmatrix}; \\ \hat{H}_{13}^{CL} &= \begin{pmatrix} -t_1 & 0 \\ t_1 & 0 \end{pmatrix}; \hat{H}_{23}^{CL} = \begin{pmatrix} 0 & t_2 \\ 0 & -t_2 \end{pmatrix}; \\ \hat{H}_{13}^{rTL} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \hat{H}_{23}^{rTL} = \begin{pmatrix} 0 & t_2 \\ 0 & t_2 \end{pmatrix}; \\ \hat{H}_{13}^{rCL} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \hat{H}_{23}^{rCL} = \begin{pmatrix} 0 & t_2 \\ 0 & -t_2 \end{pmatrix};\end{aligned}\tag{6}$$

với $t_1 = t_2 = 5.72$ eV.

Cuối cùng $\hat{H}_{33}(\vec{k})$ là Hamiltonian cho tương tác giữa các nguyên tử H:

$$\hat{H}_{33}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \hat{H}_{H_1H_1} & \hat{H}_{H_1H_2} \\ \hat{H}_{H_2H_1} & \hat{H}_{H_2H_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_p & 0 \\ t_p & 0 \end{pmatrix}\tag{7}$$

với $t_p = -2,4$ eV.

Từ biểu thức của Hamiltonian (2), ta có thể viết ra ma trận hàm Green qua mối liên hệ [21]:

$$\hat{G}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n \hat{I} - \hat{H}_{HBLG}(\vec{k})},\tag{8}$$

trong đó, $\hat{I}$ là ma trận đơn vị, $i\omega_n \rightarrow \mathcal{E} + i0^+$ là tần số Matsubara, với 0^+ là số thực dương rất nhỏ mang thứ nguyên năng lượng. Từ đó, có thể thu được biểu thức cho DOS:

$$D(\mathcal{E}) = -\frac{1}{2\pi N_a N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\mu=1}^6 \Im G^{\mu\mu}(\vec{k}, \mathcal{E}),\tag{9}$$

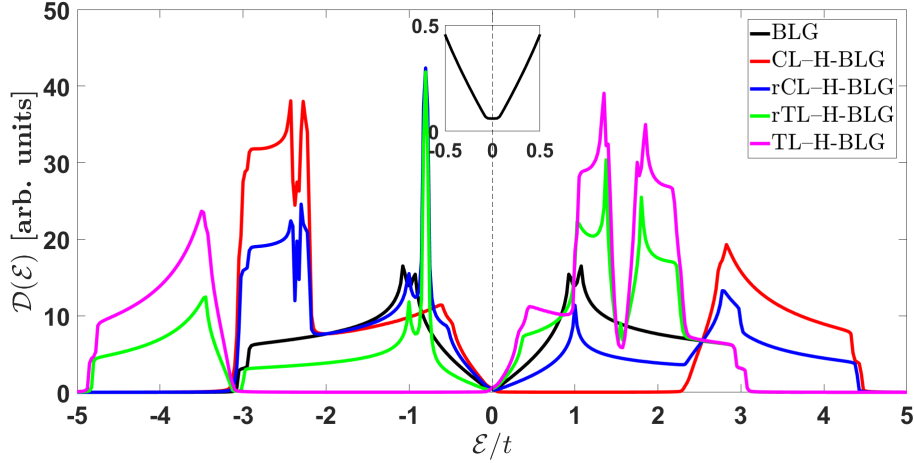
trong đó, N_a và N_c lần lượt là số nguyên tử trong một ô đơn vị và số ô đơn vị. Trong công thức trên, tổng theo $\vec{k}$ được lấy trong vùng Brillouin thứ nhất (FBZ) trong không gian mạng đảo. Trong mục tiếp theo, chúng tôi sẽ trình bày các kết quả tính số đối với biểu thức giải tích của DOS cho bởi công thức (9).

3 KẾT QUẢ TÍNH SỐ VÀ THẢO LUẬN

Trong mục này, chúng tôi sẽ khảo sát chi tiết DOS như là một hàm của năng lượng điện tử trong H-BLG với các kiểu hydro hóa khác nhau trong hai trường hợp: không có và có mặt một điện trường ngoài không đổi. Để thuận tiện, chúng tôi sử dụng t là đơn vị đo của năng lượng trong các tính toán số.

Trước khi phân tích các kết quả thu được, ta hãy nhắc lại ý nghĩa của DOS. DOS cho ta thông tin về sự phân bố các trạng thái của các hạt tải (electron và lỗ trống) trong một hệ. Cụ thể, DOS cho ta biết số trạng thái trên mỗi đơn vị năng lượng, chẳng hạn mỗi eV, trong từng vùng năng lượng. Theo đó, sự xuất hiện các trạng thái suy biến phụ thuộc vào các đỉnh cực đại trong đường cong biểu diễn DOS. Lưu ý rằng sự khác biệt chính giữa các mức năng lượng lấp đầy và các mức chưa lấp đầy đó là các đỉnh cực đại DOS càng cao thì số các mức lấp đầy càng nhiều và ngược lại.

3.1. DOS của BLG và H-BLG khi không có điện trường

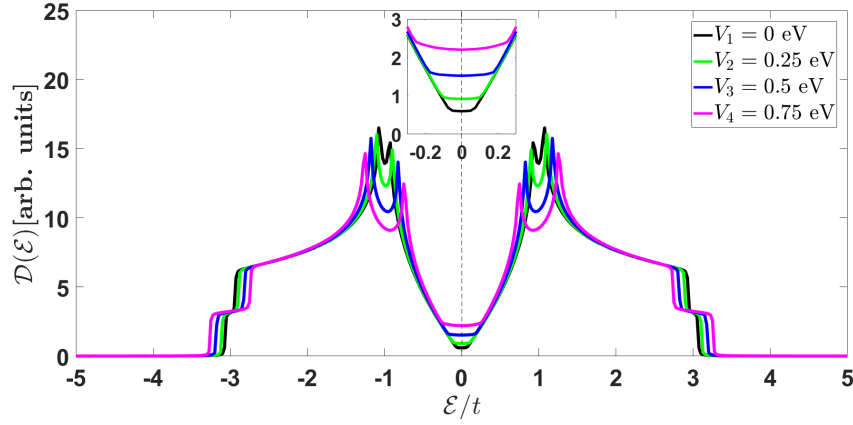


Hình 2: DOS trong BLG thuần khiết và H-BLG với các kiểu hydro hóa khác nhau khi không có điện trường ngoài.

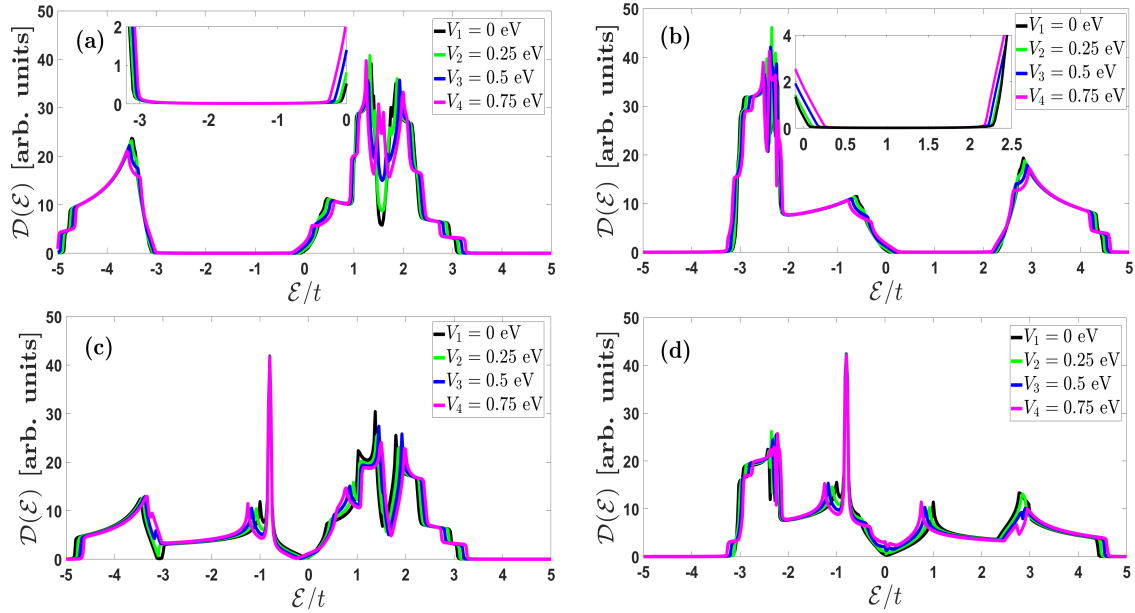
Hình 2 mô tả sự phụ thuộc của DOS vào tham số không thứ nguyên $\mathcal{E}/t$ đối với các cấu trúc graphene hai lớp khác nhau: BLG thuần khiết (đường màu đen), TL-H-BLG (đường màu hồng), CL-H-BLG (đường màu đỏ), rTL-H-BLG (đường màu xanh lá cây) và rCL-H-BLG (đường màu xanh đậm) khi không có mật điện trường không đối ($V = 0$). Từ hình vẽ ta có thể thấy rằng DOS đối với BLG thuần khiết phù hợp tốt với giá trị thu được trong công trình [22]. Điều đó cho thấy sự đúng đắn và độ tin cậy của phương pháp mà chúng tôi sử dụng để tính toán DOS và là cơ sở để chúng tôi tiếp tục phân tích các đặc trưng của DOS trong các cấu trúc H-BLG khác nhau. Từ hình vẽ ta cũng thấy rằng DOS trong các cấu trúc H-BLG thay đổi mạnh so với BLG thuần khiết. Xuất hiện các vùng cấm có độ rộng khoảng $2, 2t$ và $3, 1t$ tương ứng trong CL-H-BLG và TL-H-BLG. Các giá trị này cho thấy CL-H-BLG và TL-H-BLG là các bán dẫn. Như vậy, dưới tác dụng của hydro hóa, đã có sự chuyển pha trong graphene hai lớp từ bán kim loại sang bán dẫn. Bên cạnh đó, với các cấu trúc rTL-H-BLG và rCL-H-BLG, DOS cũng thay đổi mạnh, giá trị của DOS tăng mạnh tại một số giá trị của năng lượng $\mathcal{E}/t$ và xuất hiện nhiều kỳ dị van Hove hơn so với graphene hai lớp thuần khiết. Điều này được giải thích là do khi bị hydro hóa, sự có mặt của các điện tử trong các nguyên tử hydro làm tăng số lượng điện tử của hệ và do vậy số trạng thái điện tử cũng phải tăng lên, dẫn đến DOS tăng.

3.2. Ảnh hưởng của điện trường lên DOS của H-BLG

Ảnh hưởng của điện trường lên DOS được thể hiện trong các phương trình (3) và (4) cho Hamiltonian. Bây giờ chúng tôi sẽ làm rõ ảnh hưởng của điện trường lên các đặc trưng của DOS trong các cấu trúc nói trên. Để thuận tiện chúng tôi chọn đơn vị của thế năng tĩnh điện (eV) làm đơn vị đo của điện trường tương ứng.

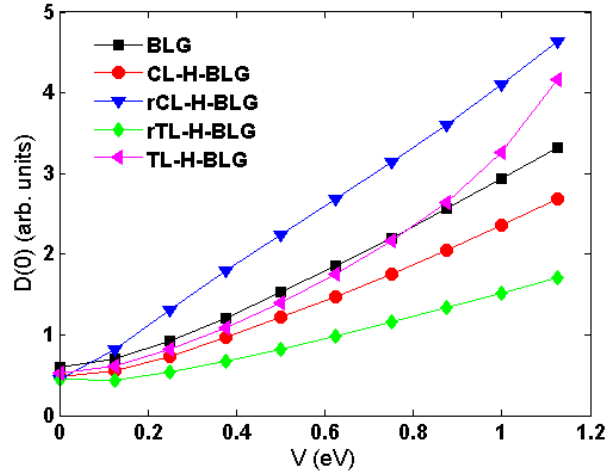


Hình 3: DOS trong BLG thuần khiết tại một số giá trị khác nhau của điện trường.

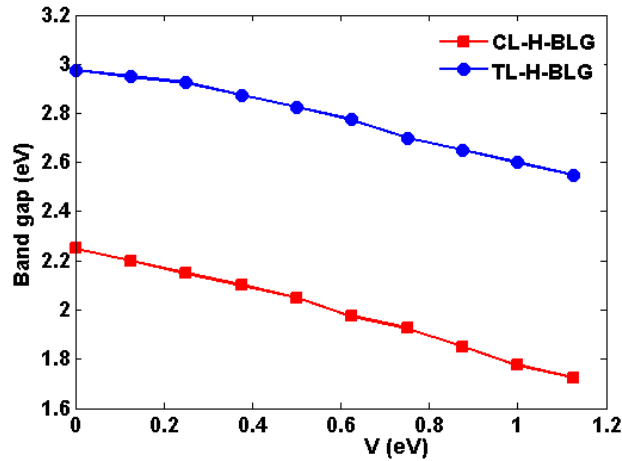


Hình 4: DOS theo năng lượng trong TL-H-BLG (a), CL-H-BLG (b), rTL-H-BLG (c) và rCL-H-BLG tại một số giá trị khác nhau của điện trường V .

Trước hết, chúng tôi xét ảnh hưởng của điện trường lên DOS trong BLG thuần khiết, được chỉ ra trên Hình 3. Hình vẽ cho thấy khi tăng giá trị của điện trường thì số lượng các kỳ



Hình 5: Sự phụ thuộc của DOS tại mức năng lượng Fermi vào điện trường trong các cấu trúc graphene hai lớp khác nhau.



Hình 6: Sự phụ thuộc của độ rộng vùng cấm vào điện trường trong TL-H-BLG (các chấm tròn) và CL-H-BLG (các chấm vuông).

dị van Hove trong DOS không thay đổi, tức là không làm xuất hiện thêm các trạng thái suy biến. Ngoài ra, khi điện trường tăng lên thì độ rộng của các kỳ dị van Hove mở rộng ra và độ cao các đỉnh kỳ dị giảm xuống. Điều này hoàn toàn phù hợp về mặt vật lý, bởi vì thực tế sự có mặt của điện trường không làm thay đổi số điện tử toàn phần trong các vùng năng lượng (số điện tử bảo toàn), có nghĩa là về mặt hình học, diện tích hình phẳng giới hạn bởi đường cong biểu diễn DOS và trục năng lượng $\mathcal{E}/t$ phải bảo toàn khi điện trường thay đổi. Bên cạnh đó, giá trị của DOS tại vị trí mức Fermi ($D(0)$) tăng lên khi tăng điện trường tăng, dẫn đến xuất hiện pha bán kim loại quá độ.

Tương tự, chúng tôi tiếp tục phân tích ảnh hưởng của điện trường lên DOS trong H-BLG với các kiểu hydro hóa khác nhau. Hình 4 mô tả DOS trong H-BLG tại một số giá trị khác nhau của điện trường. Nhìn chung, DOS trong tất cả các cấu trúc H-BLG phụ thuộc rõ rệt vào điện trường. Sự thay đổi của $D(0)$ theo điện trường trong BLG thuần khiết cũng như trong các cấu trúc H-BLG khác nhau được chỉ ra trên Hình 5. Ngoài ra, từ Hình 4 ta cũng thấy rằng khi điện trường tăng thì bề rộng vùng cấm trong TL-H-BLG và CL-H-BLG bị thu hẹp. Điều này có thể giải thích là do tác dụng của điện trường đã làm cho điện tử ở vùng dẫn và lỗ trống ở vùng hóa trị dịch chuyển lại gần nhau, tức là đỉnh của vùng hóa trị và đáy của vùng dẫn càng gần nhau khi điện trường càng tăng, dẫn đến độ rộng vùng cấm giảm theo điện trường. Sự phụ thuộc của độ rộng vùng cấm trong TL-H-BLG và CL-H-BLG vào điện trường ngoài được chỉ ra trên Hình 6. Sự phụ thuộc của DOS vào điện trường là cơ sở của kĩ thuật thay đổi bề rộng vùng cấm của vật liệu H-BLG bằng điện trường. Ta có thể thu được vật liệu có độ rộng vùng cấm như ý muốn bằng cách chọn giá trị điện trường thích hợp.

4 KẾT LUẬN

Chúng tôi đã nghiên cứu ảnh hưởng của điện trường ngoài lên tính chất điện tử của BLG thuần khiết và H-BLG với bốn kiểu hydro hóa khác nhau. Giá trị của DOS thu được bằng lý thuyết hàm Green sử dụng Hamiltonian liên kết mạnh trong BLG thuần khiết phù hợp tốt với các kết quả thu được bởi các tác giả khác. Nhìn chung, DOS tại vị trí mức Fermi tăng khi cường độ điện trường tăng trong tất cả các cấu trúc. Đặc biệt, độ rộng vùng cấm trong TL-H-BLG và CL-H-BLG thay đổi đáng kể khi điện trường thay đổi. Đặc điểm này là cơ sở cho các ứng dụng của điện trường trong việc điều chỉnh độ rộng vùng cấm cũng như các tính chất quang điện liên quan trong các thiết bị quang điện tử nano, phù hợp với từng ứng dụng cụ thể.

Lời cảm ơn

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển khoa học và công nghệ Quốc gia (NAFOS-TED) trong đề tài mã số 103.01-2017.361.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Xia F., Farmer D.B., Lin T.M., Avouris P. (2010), *Nano Lett.*, **10**, pp. 715-718.
- [2] Giovannetti G., Khomyakov P.A., Brocks G., Kelly P.J., van den Brink J. (2007), *Phys. Rev. B*, **76**, p. 073103.
- [3] Chen X.F., Lian J.S., Jiang Q. (2012), *Phys. Rev. B*, **86**, p. 125437.
- [4] Zhang Y., et al. (2009), *Nature*, **459**, pp. 820-823.
- [5] Castro E.V., et al. (2007), *Phys. Rev. Lett.*, **99**, p. 216802.
- [6] Gui G., Li J., Zhong J. (2008), *Phys. Rev. B* **78**, 075435.
- [7] Sun L., Li Q., Ren H., Su H., Shi Q.W., Yang J. (2008), *J. Chem. Phys.*, **129**, p. 074704.
- [8] Dai Q.Q., Zhu Y., Jiang Q. (2013), *J. Phys. Chem. C*, **117**, pp. 4791-4799.
- [9] Dai Q.Q., Zhu Y.F., Jiang Q. (2014), *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **16**, pp. 10607-10613.
- [10] Li L., et al. (2011), *ACS Nano*, **5**, pp. 2601-2610.
- [11] Elias D.C., et al. (2009), *Science*, **323**, pp. 610-613.
- [12] Zhou J., Wang Q., Sun Q., Chen X.S., Kawazoe Y., Jena P. (2009), *Nano Lett.*, **9**, pp. 3867-3870.
- [13] Haberer D., et al. (2010), *Nano Lett.*, **10**, pp. 3360-3366.
- [14] Choi S.-M., Jhi S.-H., Son Y.-W. (2010), *Nano Lett.*, **10**, pp. 3486-3489.
- [15] Luo Z., Yu T., Kim K., Ni Z., You Y., Lim S., Shen Z., Wang S., Lin J. (2009), *ACS Nano*, **3**, pp. 1781-1788.
- [16] Killi M., Wu S., Paramakanti A. (2011), *Phys. Rev. Lett.*, **107**, p. 086801.
- [17] Lopes dos Santos J.M.B., Peres N.M.R., Castro Neto A.H. (2007), *Phys. Rev. Lett.*, **99**, p. 256802.
- [18] Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S. (1998), *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, London.
- [19] Zolyomi V., Wallbank J.R., Falko V.I. (2014), *2D Mater.*, **1**, p. 011005.
- [20] Grassi R., Low T., Lundstrom M. (2011), *Nano Lett.*, **11**, pp. 4574-4578.
- [21] Mahan G.D. (1993), *Many Particle Physics*, Plenum Press, New York.
- [22] Tabert C.J., Nicol E.J. (2012), *Phys. Rev. B*, **86**, p. 075439.

Title: ELECTRONIC DENSITY OF STATES IN HYDROGENATED BILAYER GRAPHENE UNDER THE INFLUENCE OF A DC ELECTRIC FIELD

Abstract: In this work, we investigate the electronic density of states (DOS) in hydrogenated bilayer graphene (H-BLG) subjected in a dc electric field. Four different types of hydrogenation are considered: table-like H-BLG (TL-H-BLG), chair-like H-BLG (CL-H-BLG), reduced table-like H-BLG (rTL-H-BLG) and reduced chair-like H-BLG (rCL-H-BLG). The expression of the DOS is obtained by its relation to the Green function, using Hamiltonian in the tight-binding approximation. Numerical results show that pristine bilayer graphene is a semimetal, while the CL-H-BLG and TL-H-BLG are semiconductors. Besides, the external electric field has a strong influence on the DOS. In all structures, the DOS at the Fermi energy level increases with increasing the electric field strength. In addition, the band gap in CL-H-BLG and TL-H-BLG structures decreases with the electric field strength. The above characteristics are the basis for the use of an electric field to adjust the electronic properties of H-BLG so that it is suitable for applications in nano-optoelectronic devices.

Keywords: bilayer graphene, hydrogenation, density of states, tight-binding model.