

# PERHITUNGAN NUMERIK RAPAT KEADAAN *GRAPHENE BILAYER* DENGAN MODEL *TIGHT-BINDING* MENGGUNAKAN METODE RAMBATAN WAKTU TROTTER-SUZUKI

Wahyu Setiawan\*

Institut Alif Muhammad Imam Syafi'i Lamongan

e-mail\*: [w.setiawan@mail.ugm.ac.id](mailto:w.setiawan@mail.ugm.ac.id)

Diterima 20 April 2023

Disetujui 22 Agustus 2023

Dipublikasikan 31 Agustus 2023

<https://doi.org/10.33369/jkf.6.2.83-96>

## ABSTRAK

Perhitungan rapat keadaan (*density of states/DOS*) material *graphene bilayer* model ikatan kuat atau *Tight-Binding* (TB) melalui penyelesaian persamaan Schrödinger Gayut Waktu (PSGW) telah dilakukan dengan menggunakan metode rambatan waktu Trotter-Suzuki. Fungsi gelombang awal  $|\psi(0)\rangle$  dibangkitkan dengan menggunakan bilangan acak kompleks sebagai fungsi superposisi dari basis tiap-tiap *site* atom berstruktur heksagonal untuk memperoleh fungsi korelasi. Nilai rapat keadaan dihitung dengan mentransformasi Fourier fungsi korelasi yang sudah didapatkan. Penelitian ini terfokus pada perhitungan rapat keadaan dari *graphene bilayer* model *AA-Stacking*. Hasil penelitian menunjukkan bahwa metode rambatan waktu Trotter-Suzuki sangat efisien digunakan untuk menghitung rapat keadaan dari sistem atom yang besar. Model TB dapat menjelaskan rapat keadaan material *graphene bilayer* dengan variasi ukuran sistem dan *hopping parameter*. Banyaknya jumlah atom (*site*) yang ditinjau mempengaruhi keteraturan hasil perhitungan rapat keadaan. Semakin banyak atom yang ditinjau, semakin teratur perhitungan rapat keadaan yang dihasilkan. Variasi nilai *hopping interlayer* mengakibatkan munculnya singularitas van Hove di level tenaga Fermi untuk  $t_1 = t_2$  dan bertambahnya sifat *metallicity* akibat bertambahnya nilai DOS pada level tenaga Fermi untuk  $t_1 < t_2$

**Kata kunci:** *graphene bilayer*, rapat keadaan, dan metode Trotter-Suzuki,

## ABSTRACT

The density of states (DOS) of the bilayer graphene material with Tight-Binding (TB) model has been calculated by solving the Time Dependent Schrödinger Equation (TDSE) with Trotter-Suzuki formula. The generation of the initial wave function  $|\psi(0)\rangle$  is carried out by using a random complex number as a superposition function of the base of each hexagonal structure atomic site to obtain the correlation function. The results of the calculation of the correlation function are then Fourier transformed to calculate the density of the state. This research focuses on calculating the state density of the graphene bilayer AA-Stacking. The results showed that the Trotter-Suzuki method was very efficient in calculating the state density of large atomic systems. The TB model can explain the density of states of the bilayer graphene material with variations in system size and hopping parameters. The number of atoms (sites) reviewed affects the regularity of the DOS calculation results. The more atoms that are reviewed, the more orderly the DOS calculations will be generated. The variation of the hopping interlayer value would be appearing van Hove singularity at the Fermi level for  $t_1 = t_2$  and increase in the metallicity properties with the increase in the DOS value at the Fermi level for  $t_1 < t_2$ .

**Keywords:** *bilayer graphene*, *density of states*, *Trotter-Suzuki formula*

## I. PENDAHULUAN

*Graphene* merupakan kumpulan atom karbon *monolayer* yang tersusun membentuk struktur kristal heksagonal menyerupai sarang lebah dalam dua dimensi. *Graphene* memiliki luas permukaan yang spesifik sebesar  $2630 \text{ m}^2\text{g}^{-1}$ , mobilitas elektrik sebesar  $2 \times 10^6 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ , konduktivitas termal sebesar  $5000 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ , dan transmitansi optik 97,7 % (1). Dirac Fermion, *ballistic electron transport*, efek Hall kuantum dan *chiral tunneling* merupakan beberapa sifat khas yang dimiliki oleh *grapheme* (2). Terdapat dua titik yang saling berhimpit pada sudut-sudut zona Brillouin berbentuk heksagonal, yaitu K dan K' yang disebut titik Dirac. Struktur pita yang terletak dekat dengan titik

Dirac ini memiliki dispersi energi seperti dispersi energi partikel ultrarelativistik. Sifat partikel *graphene* yang dideskripsikan sebagai Fermion Dirac tak bermassa menyebabkan *graphene* memiliki sifat listrik dan optik yang sangat menarik untuk dipelajari dan memiliki peluang besar untuk diaplikasikan dalam bidang *photonics* dan *optoelektronics* (3).

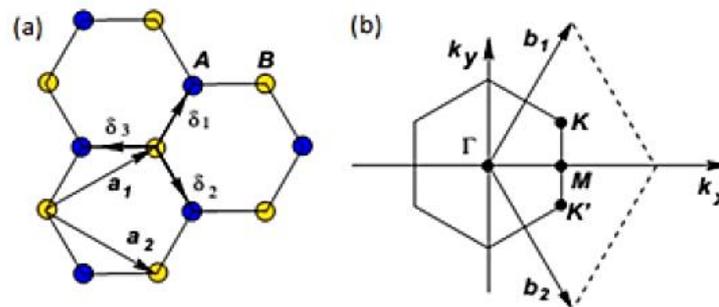
Secara umum, sifat dari *graphene bilayer* dan *monolayer* adalah sama. Beberapa sifat yang membedakan adalah Efek quantum Hall pada *graphene bilayer* lebih baik daripada di *monolayer* karena menunjukkan adanya kuasipartikel kiral masif dengan dispersi parabola pada energi rendah (4). Selain sifat dasar yang menarik, *graphene bilayer* memiliki potensi untuk aplikasi elektronik, paling tidak karena kemungkinan untuk mengontrol *carrier density* dan energi *band gap* melalui doping atau *gating* (4).

*Graphene bilayer* terdiri dari dua lapis susunan atom karbon yang saling terkopel. Setiap susunan atom karbon berbentuk heksagonal yang menyerupai sarang lebah. Gambar 1.1 menunjukkan struktur kristal *graphene monolayer* dan gambar 1.2 untuk *graphene bilayer*. Vektor kisi *graphene* dapat ditulis sebagai:

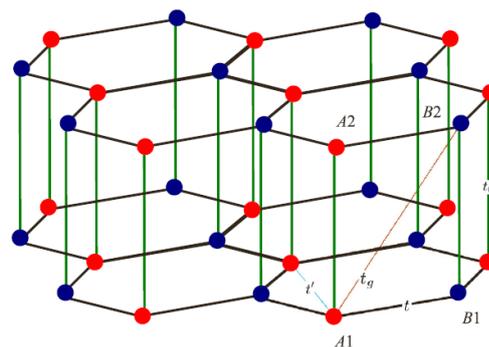
$$\mathbf{a}_1 = \left( \frac{3a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2} \right), \mathbf{a}_2 = \left( \frac{3a}{2}, -\frac{\sqrt{3}a}{2} \right) \tag{1.1}$$

dimana  $a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| \approx 2,46 \text{ \AA}$  merupakan konstanta kisi, yaitu jarak antara unit sel yang berdekatan. Konstanta kisi ini berbeda dengan panjang ikatan antar karbon  $a_{CC} = \frac{\sqrt{3}a}{3}$  yang merepresentasikan jarak antar atom karbon yang berdekatan. Vektor kisi balik *graphene* dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{b}_1 = \left( \frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi\sqrt{3}}{3a} \right), \mathbf{b}_2 = \left( \frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi\sqrt{3}}{3a} \right) \tag{1.2}$$



Gambar 1. (a) Struktur kisi *graphene*, (b) Zona brillouin *graphene* (2)



Gambar 2. Struktur kristal *graphene bilayer* model AA-Stacking (5)

Terdapat dua titik, titik  $K$  dan  $K'$ , di tepi Zona Brillouin yang dinamakan titik Dirac. Titik Dirac adalah titik bertemunya pita konduksi dan pita valensi yang pada ruang momentum dengan posisi titik tersebut berada pada (2):

$$K = \left( \frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \text{ dan } K' = \frac{a}{2} \left( \frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \tag{1.3}$$

Pada ruang *real*, tiga vektor atom tetangga terdekat besarnya adalah:

$$\delta_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}); \delta_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}); \delta_3 = a(1, 0) \quad (1.4)$$

Ikatan yang terbentuk dari tiap layer adalah ikatan *kovalen*, sedangkan ikatan antar *layer* adalah ikatan Van Der Waals. *Graphene bilayer* memiliki 4 atom per unit sel. Terdapat tiga model yang dapat menggambarkan *graphene bilayer*, yaitu *AA-Stacking*, *AB-Stacking*, dan *twisted bilayer*. Dari ketiganya, paling sederhana adalah model *AA-Stacking* (5). Model *AA-Stacking* terdiri dari dua lapisan *graphene monolayer* yang bentuk dan susunan atomnya sama antara *layer* satu dan *layer* dua seperti ditunjukkan pada Gambar 1.2.

Ada banyak cara dalam menggambarkan DOS dari *graphene*. Salah satu metode yang bisa digunakan adalah menggunakan model ikatan kuat (*tight-binding*). Model *tight-binding* memiliki ongkos komputasi yang rendah sehingga dapat dilakukan simulasi sistem dengan ukuran besar (6). Hal tersebut dapat diwujudkan dengan menghindari perhitungan banyak suku yang muncul dalam kuantisasi pertama dengan mendefinisikan matriks Hamiltonian dari sistem banyak partikel dalam notasi kuantisasi kedua (6). Perhitungan rapat keadaan dalam metode *tight-binding* dapat dilakukan dengan melakukan diagonalisasi matriks Hamiltonian dari sistem yang ingin dikaji. Jika sistem yang dikaji memiliki ukuran yang cukup besar, metode tersebut menjadi tidak efektif, karena ukuran matriks Hamiltoniannya juga besar sehingga memerlukan memori komputer yang cukup besar untuk melakukan diagonalisasi. Maka diperlukan metode numerik lain untuk mendapatkan nilai rapat keadaan dari Hamiltonian sistem (7). Salah satu metode yang dapat adalah metode perambatan waktu yang menggunakan kaitan operator evolusi waktu dari solusi Persamaan Schrödinger Gayut Waktu (PSGW) sistem (8).

Terdapat beberapa metode yang dapat digunakan untuk mencari solusi dari PSGW. Penyelesaian PSGW dapat dilakukan dengan menggunakan deret Chebyshev untuk melakukan aproksimasi dari operator evolusi waktu solusi PSGW (9). Sedangkan (10) menggunakan metode Krylov subspace untuk memproyeksikan matriks Hamiltonian. Metode lain yang dapat digunakan adalah dengan menggunakan metode rambatan waktu Trotter-Suzuki untuk melakukan aproksimasi dari operator evolusi waktu (8). Metode rambatan waktu Trotter-Suzuki memiliki kelebihan dapat meminimalisasi ongkos komputasi saat melakukan aproksimasi dari operator eksponensial (11).

Metode rambatan waktu Trotter-Suzuki berhasil diimplementasikan untuk mendapatkan nilai rapat keadaan dari sistem *graphene* murni maupun yang mengalami ketidakteraturan (12). Metode tersebut dapat digunakan pada sistem yang kecil maupun sistem yang sangat besar dengan ongkos komputasi yang lebih rendah daripada metode lain. Ariasoca TA, Sholihun, dan Santoso I (12) telah melakukan perhitungan numerik rapat keadaan pada sistem dengan ukuran  $4096 \times 4096$  atom yang hasilnya mendekati grafik hasil perhitungan secara analitik.

Berdasarkan pertimbangan dan kajian mengenai hasil penelitian yang telah dilakukan sebelumnya maka akan dilakukan perhitungan numerik rapat keadaan *graphene bilayer* dengan model *tight-binding* menggunakan metode rambatan waktu Trotter-Suzuki.

## II. METODE PENELITIAN

### 2.1 Alat dan Bahan

Program untuk perhitungan solusi PSGW dengan metode rambatan waktu Trotter-Suzuki dan perhitungan fungsi korelasi dibuat dengan menggunakan bahasa C++ (Bell Labs, Amerika Serikat) Sedangkan perhitungan rapat keadaan dan plot grafik menggunakan Python 2.7. Program kemudian dijalankan pada laptop merk HP tipe 14s-fq0020AU (California, Amerika Serikat) dengan spesifikasi CPU AMD Ryzen 3 3250U 2.6 GHz, 4 cores, RAM 8 GB.

### 2.2 Perhitungan Numerik

Diagram alir penelitian secara keseluruhan dapat ditulis sebagai berikut:



**Gambar 3. Diagram Alir Penelitian**

2.2.1 Model *Tight-binding*

Model *tight-binding* adalah sebuah aproksimasi yang digunakan untuk melakukan perhitungan struktur elektronik dari sebuah material dengan menggunakan fungsi gelombang berdasarkan superposisi dari fungsi gelombang yang terisolasi dalam masing-masing atom yang disebabkan oleh elektron yang terikat sangat kuat dengan atomnya. Telah dilakukan perhitungan rapat keadaan dari *graphene bilayer* dengan menggunakan model *tight-binding* dan memanfaatkan superposisi dari *site-site* atom sebagai fungsi gelombang (13).

Pada *graphene monolayer* terdiri dari atom karbon yang mengalami hibridisasi  $sp^2$ , dengan 3 elektron valensi dari karbon berikatan dengan tetangga terdekat membentuk ikatan  $\sigma$  dan satu atom valensi tersisa disebut sebagai elektron  $\pi$ . Menurut (2), kajian tentang elektron  $\pi$  relevan digunakan untuk menghitung struktur elektronik *graphene* karena elektron  $\pi$  mudah berpindah dari satu kisi ke kisi lain. Untuk *graphene bilayer*, dapat dilakukan penyesuaian perhitungan interaksi antar atomnya dengan menggunakan model *AA-stacking*.

Pada notasi kuantisasi kedua, operator yang digunakan adalah operator kreasi ( $c_\alpha^+$ ) dan anihilasi ( $c_\alpha$ ) untuk setiap keadaan  $|\alpha\rangle$ . Operator tersebut memenuhi sifat antikomutasi.

$$\{c_\alpha, c_{\alpha'}^+\} = c_\alpha c_{\alpha'}^+ + c_{\alpha'}^+ c_\alpha = \delta_{\alpha\alpha'} \tag{2.1}$$

Berdasarkan kreasi dan anihilasi tersebut dapat didefinisikan operator medan.

$$\hat{\psi}^+(\vec{r}) = \sum_\alpha \varphi_\alpha^* c_\alpha^+ \tag{2.2}$$

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_\alpha \varphi_\alpha c_\alpha \tag{2.3}$$

$$\{\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^+(\vec{r}')\} = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \tag{2.4}$$

Dengan menggunakan kaitan operator medan tersebut, maka operator energi kinetik dalam notasi kuantisasi kedua dapat ditulis dengan:

$$\hat{T} = \sum_{i,j} \int \left\{ \varphi_i^*(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \varphi_j(\vec{r}) \right\} d\vec{r} c_i^+ c_j \tag{2.5}$$

Dalam pendekatan *tight-binding*, nilai  $\int \left\{ \varphi_i^+(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \varphi_j(\vec{r}) \right\} d\vec{r}$  dapat dianggap sebagai suatu nilai skalar  $-t_{ij}$  yang disebut dengan *hopping parameter*. *Hopping parameter* menunjukkan kebolehjadian elektron meloncat ke kisi tetangga terdekat. Untuk suku operator energi potensial dapat ditulis dengan:

$$\hat{U} = \sum_{i,j} \int \left\{ \varphi_i^+(\vec{r}) U(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \right\} d\vec{r} c_i^\dagger c_j \quad (2.6)$$

nilai dari  $\int \left\{ \varphi_i^+(\vec{r}) U(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}) \right\} d\vec{r}$  dapat dianggap sebagai suatu nilai scalar  $v_i$  yang merupakan *on-site potential* yang menggambarkan energi elektron di orbital tersebut.

Secara umum, Hamiltonian model *tight-binding* dari material graphene *multilayer* dapat ditulis sebagai (13):

$$H = \sum_{l=1}^N H_l + \sum_{l=1}^{N-1} H'_l \quad (2.7)$$

dengan  $H_l$  adalah Hamiltonian dari graphene *single layer* sebanyak  $l$ -layer dan  $H'_l$  mendeskripsikan *hopping* antara lapisan  $l$  dan lapisan  $l + 1$ .

Hamiltonian *graphene single layer* diberikan oleh:

$$H_l = H_0 + H_v \quad (2.8)$$

dengan  $H_0$  merupakan suku Hamiltonian Kinetik diturunkan dari *hopping parameter* tetangga terdekat antar atom karbon.

$$H_0 = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} c_i^\dagger c_j \quad (2.9)$$

$H_v$  merupakan suku Hamiltonian potensial yang terkait dengan nilai *on-site* potensial dari atom karbon.

$$H_v = \sum_i v_i c_i^\dagger c_i \quad (2.10)$$

Sedangkan Hamiltonian interlayer dari *graphene bilayer* dapat ditulis dengan

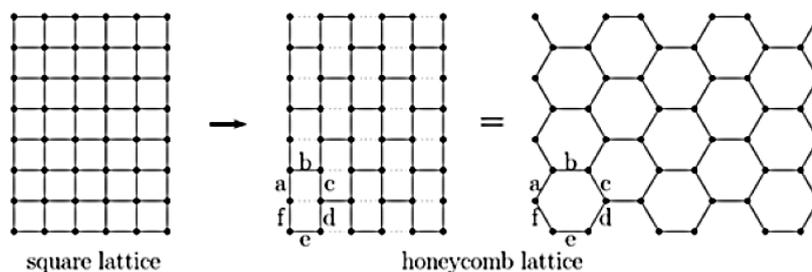
$$\hat{H} = -t_2 \sum_j (a_{l,j}^\dagger a_{l+1,j} + H.c.) \quad (2.11)$$

dengan  $t_2$ ,  $a_{l,j}^\dagger$ ,  $a_{l+1,j}$ , dan *H.c.* masing-masing adalah *hopping parameter* antar lapisan *graphene* untuk tetangga terdekat pertama, operator kreasi pada atom karbon di sub kekisi A pada lapisan  $l$ , operator annihilasi pada atom karbon di sub kekisi A pada lapisan  $l+1$ , dan konjugat Hamiltonian dari suku pertama.

### 2.2.2 Matriks Hamiltonian

Matriks Hamiltonian graphene dapat dibangun dengan menggunakan persamaan 2.11. Indeks kolom  $i$  dan  $j$  pada matriks menunjukkan indeks kisi pada sistem yang diwakilkan oleh operator kreasi dan anihilasi. Jika terjadi loncatan elektron dari suatu kisi dengan kisi tetangga terdekatnya, maka komponen matriksnya berisi parameter hopping  $-t_{ij}$ . Pada *graphene bilayer* terdapat dua *hopping parameter*, yaitu *hopping parameter* pada satu lapisan ( $-t_1$ ) dan *hopping parameter* antar layer ( $-t_2$ ).

Untuk implementasi numerik, kisi segienam graphene akan didekati dengan *brickwall lattice* (14) seperti ditunjukkan pada gambar 3.2.



Gambar 4. Pendekatan *brickwall lattice* pada *graphene* (14)

*Graphene bilayer* terdiri dari dua buah *graphene monolayer* yang saling berikatan. *Graphene monolayer* memiliki 3 tetangga terdekat, sehingga ada 3 kemungkinan loncatan elektron dari suatu kisi. Sedangkan pada *graphene bilayer*, terdapat 4 tetangga terdekat sehingga ada 4 kemungkinan loncatan elektron dari suatu kisi. Dengan menggunakan metode pengisian matriks Hamiltonian, maka matriks Hamiltonian *graphene bilayer* dapat ditulis sebagai matriks  $2N^2 \times 2N^2$ .

$$H = \begin{bmatrix} A & B & 0 & \dots & 0 & C \\ B & A & C & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & C & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ C & \dots & \dots & \dots & \ddots & A \end{bmatrix} \tag{2.12}$$

dengan A, B, dan C merupakan matriks blok yang masing-masing berukuran  $2N \times 2N$ . Misalkan untuk sistem  $4 \times 4$  dengan model *AA-Stacking*, maka matriks bloknya dapat ditulis:

$$A = \begin{bmatrix} V & -t_1 & 0 & -t_1 & -t_2 & 0 & 0 & 0 \\ -t_1 & V & -t_1 & 0 & 0 & -t_2 & 0 & 0 \\ 0 & -t_1 & V & -t_1 & 0 & 0 & -t_2 & 0 \\ -t_1 & 0 & -t_1 & V & 0 & 0 & 0 & -t_2 \\ V & -t_1 & 0 & -t_1 & -t_2 & 0 & 0 & 0 \\ -t_1 & V & -t_1 & 0 & 0 & -t_2 & 0 & 0 \\ 0 & -t_1 & V & -t_1 & 0 & 0 & -t_2 & 0 \\ -t_1 & 0 & -t_1 & V & 0 & 0 & 0 & -t_2 \end{bmatrix} \tag{2.13}$$

$$B = \begin{bmatrix} V & -t_1 & 0 & 0 & -t_2 & 0 & 0 & 0 \\ -t_1 & V & 0 & 0 & 0 & -t_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V & -t_1 & 0 & 0 & -t_2 & 0 \\ 0 & 0 & -t_1 & V & 0 & 0 & 0 & -t_2 \\ V & -t_1 & 0 & 0 & -t_2 & 0 & 0 & 0 \\ -t_1 & V & 0 & 0 & 0 & -t_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V & -t_1 & 0 & 0 & -t_2 & 0 \\ 0 & 0 & -t_1 & V & 0 & 0 & 0 & -t_2 \end{bmatrix} \tag{2.14}$$

$$C = \begin{bmatrix} V & 0 & 0 & -t_1 & -t_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V & -t_1 & 0 & 0 & -t_2 & 0 & 0 \\ 0 & -t_1 & V & 0 & 0 & 0 & -t_2 & 0 \\ -t_1 & 0 & 0 & V & 0 & 0 & 0 & -t_2 \\ V & 0 & 0 & -t_1 & -t_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V & -t_1 & 0 & 0 & -t_2 & 0 & 0 \\ 0 & -t_1 & V & 0 & 0 & 0 & -t_2 & 0 \\ -t_1 & 0 & 0 & V & 0 & 0 & 0 & -t_2 \end{bmatrix} \tag{2.15}$$

Dari ketiga matriks A, B, C tersebut dapat dibuat matriks blok yang berukuran  $4 \times 4$  sebagai berikut:

$$D = \begin{bmatrix} V & -t_1 & 0 & 0 \\ -t_1 & V & -t_1 & 0 \\ 0 & -t_1 & V & -t_1 \\ 0 & 0 & -t_1 & V \end{bmatrix} \tag{2.16}$$

$$E = \begin{bmatrix} 0 & -t_1 & 0 & 0 \\ -t_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t_1 \\ 0 & 0 & -t_1 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.17}$$

$$F = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -t_1 \\ 0 & 0 & -t_1 & 0 \\ 0 & -t_1 & 0 & 0 \\ -t_1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.18}$$

$$G = \begin{bmatrix} -t_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t_2 \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

Sehingga matriks A, B, dan C dapat dinyatakan dalam matriks blok E, F, G, dan H sebagai berikut.

$$A = \begin{bmatrix} D & G \\ D & G \end{bmatrix} \quad (2.20)$$

$$B = \begin{bmatrix} E & G \\ E & G \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

$$C = \begin{bmatrix} F & G \\ F & G \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

Bentuk matriks eksponensial graphene untuk operator *time evolution* dapat dicari dengan melakukan ekspansi deret Taylor dari matriks persamaan 2.12. Ekspansi deret Taylor untuk eksponensial dari suatu matriks X dapat ditulis:

$$e^X = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} X^k = 1 + X + \frac{X^2}{2!} + \frac{X^3}{3!} + \dots \quad (2.23)$$

Blok-blok matriks dari persamaan 3.19 dapat ditulis dalam 3 buah matriks, misalkan ditinjau *graphene* dengan ukuran  $4 \times 4$  maka matriks akan berukuran  $32 \times 32$  dan dapat ditulis sebagai:

$$H_0 = \begin{bmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

$$H_1 = \begin{bmatrix} 0 & B & 0 & 0 \\ B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B \\ 0 & 0 & B & 0 \end{bmatrix} \quad (2.25)$$

$$H_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & C & 0 \\ 0 & C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C \\ C & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

dengan isian matriks A, B, dan C seperti pada persamaan 3.20, 3.21, dan 3.22. Ketiga matriks tersebut dapat dilakukan penyederhanaan menjadi matriks blok  $2 \times 2$  dengan tiap komponen matriks X merupakan matriks  $8 \times 8$ :

$$M = \begin{bmatrix} 0 & X \\ X & 0 \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

Dengan menggunakan persamaan (4.1), matriks eksponensial dari matriks blok  $2 \times 2$  persamaan 4.3 dan 4.4 untuk operator 3.28 dapat ditulis:

$$e^{-i\tau M} = \begin{bmatrix} \cos X \tau & -i \sin X \tau \\ -i \sin X \tau & \cos X \tau \end{bmatrix} \quad (2.28)$$

sehingga matriks eksponensial untuk persamaan (4.3) dan (4.4) dapat ditulis:

$$e^{-i\tau H_1} = \begin{bmatrix} \cos B \tau & -i \sin B \tau & 0 & 0 \\ -i \sin B \tau & \cos B \tau & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos B \tau & -i \sin B \tau \\ 0 & 0 & -i \sin B \tau & \cos B \tau \end{bmatrix} \quad (2.29)$$

$$e^{-i\tau H_2} = \begin{bmatrix} \cos C \tau & 0 & 0 & -i \sin C \tau \\ 0 & \cos C \tau & -i \sin C \tau & 0 \\ 0 & -i \sin C \tau & \cos C \tau & 0 \\ -i \sin C \tau & 0 & 0 & \cos C \tau \end{bmatrix} \quad (2.30)$$

Sedangkan matriks eksponensial dari persamaan 4.2 dapat ditulis sebagai:

$$e^{-i\tau H_0} = \begin{bmatrix} e^{-i\tau A} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\tau A} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\tau A} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\tau A} \end{bmatrix} \quad (2.31)$$

Kemudian komponen  $e^{-i\tau A}$  akan diekspansi lagi menggunakan kaitan persamaan 2.28, dengan melakukan dekomposisi pada matriks  $A$ .

### 2.2.3 Metode Rambatan Waktu Trotter-Suzuki

Hamiltonian dari sebuah sistem adalah jumlahan dari beberapa kontribusi dari semua sistem fisis yang ditinjau secara kuantum. Hamiltonian tersebut diperoleh dalam bentuk yang sederhana jika berisikan matriks yang nilai-nilainya berada pada diagonalnya saja. Maka matriks tersebut akan dapat diselesaikan secara sederhana. Dalam beberapa kasus ditemukan Hamiltonian sistem yang sangat kompleks sehingga dibutuhkan transformasi matriks yang sangat rumit untuk menyelesaikannya. Permasalahan lain yang akan muncul jika harus menyelesaikan matriks Hamiltonian yang cukup besar. Maka dibutuhkan suatu metode yang dapat menyelesaikan kasus tersebut menjadi lebih sederhana. Metode rambatan waktu Trotter-Suzuki menjadi salah satu metode yang tepat untuk menyelesaikan Hamiltonian tersebut.

Bentuk Hamiltonian dapat diekspresikan dalam bentuk matriks eksponensial yang tersusun atas dua matriks (15):

$$e^{x(A+B)} = \lim_{m \rightarrow \infty} (e^{xA/m} e^{xB/m})^m \quad (2.32)$$

dengan  $A$  dan  $B$  merupakan matriks dengan ukuran  $N \times N$ . Persamaan (2.32) disebut dengan persamaan Trotter. Persamaan tersebut berlaku jika dan hanya jika matriks  $A$  dan  $B$  bersifat komutatif (16).

$$[A, B] = AB - BA = 0 \quad (2.33)$$

Persamaan (3.34) dapat diturunkan menggunakan deret Taylor sebagai berikut.

$$e^{\frac{x(A+B)}{m}} = 1 + \frac{x}{m}(A + B) + \frac{x^2}{2m^2}(A^2 + 2AB + B^2) + O\left(\frac{x^3}{m^3}\right) \quad (2.34)$$

Persamaan (3.36) dan (3.37) menunjukkan bahwa untuk nilai  $m$  yang cukup besar, kedua persamaan tersebut hanya bergantung pada nilai  $x$  dengan syarat kedua matriks harus bersifat komutatif (16), sehingga:

$$e^{x(A+B)} \approx e^{xA} e^{xB} \quad (2.35)$$

Untuk metode Trotter-Suzuki orde satu sebaiknya menggunakan nilai  $x$  yang cukup kecil agar persamaan (3.38) tetap berlaku. Persamaan (2.35) dapat digunakan untuk mendefinisikan sebuah aproksimasi operator langkah waktu (16):

$$U_1(\tau) = e^{-i\tau A_1} \dots e^{-i\tau A_n} \quad (2.36)$$

dengan operator konjugatnya diberikan oleh:

$$U_1^+(\tau) = e^{i\tau A_1} \dots e^{i\tau A_n} \quad (2.37)$$

Sehingga diperoleh:

$$U_1(\tau)U_1^+(\tau) = 1 \quad (2.38)$$

Disederhanakan dengan asumsi bahwa  $H$  telah dituliskan sebagai jumlahan kontribusi hermitian, yaitu  $A_i = A_i^\dagger$  untuk  $i = 1, \dots, n$ . Persamaan (2.38) mengimplikasikan bahwa  $(U_1(\tau))^{-1} = U_1^+(\tau)$  sehingga  $U_1(\tau)$  merupakan aproksimasi uniter untuk operator langkah waktu  $e^{-i\tau \hat{H}}$ .

Jika  $U(\tau) = e^{-i\tau \hat{H}}$ , maka dapat didekomposisi menjadi lebih dari 2 matriks yang dapat ditulis:

$$U(\tau) = e^{-i\tau\hat{H}_0} e^{-i\tau\hat{H}_1} \dots e^{-i\tau\hat{H}_n} \quad (2.39)$$

dengan  $n$  adalah jumlah matriks blok yang didekomposisi dari matriks  $\hat{H}$ .

Rapat keadaan merupakan jumlah keadaan per interval energi pada tiap tingkat energi yang tersedia. Persamaan rapat keadaan secara diskrit bisa dihasilkan dari transformasi Fourier. Menurut (10), persamaan tersebut didapatkan dengan transformasi Fourier dari 1, sehingga:

$$FT(1) = \delta(\varepsilon) \quad (2.40)$$

$$\delta(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{it\varepsilon} dt \quad (2.41)$$

Dengan menggunakan kaitan tersebut, maka persamaan rapat keadaan diskrit dapat ditulis sebagai:

$$D(\varepsilon) = \sum_{n=1}^D \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{it\varepsilon} e^{-itE_n} dt \quad (2.42)$$

Jika  $Tr e^{itH} = \sum_{n=1}^D e^{-itE_n}$  dan  $Tr e^{itH} = \sum_{n=1}^D \langle \varphi_n | e^{-itH} | \varphi_n \rangle$ , maka nilai rapat keadaan dapat dihitung dengan melakukan sampling sebanyak  $S$  dari keadaan awal  $|\psi(0)\rangle$  yang merupakan superposisi acak dari keadaan basis (8):

$$|\psi(0)\rangle = \sum_i a_i |i\rangle \quad (2.43)$$

dengan  $a_i$  merupakan bilangan kompleks dan  $|i\rangle$  adalah keadaan basis sehingga keadaan awal  $|\psi(0)\rangle$  merupakan sebuah vektor yang berisi bilangan kompleks. Sehingga untuk sampling sebanyak  $S$  suatu keadaan dapat ditulis (8):

$$\lim_{S \rightarrow \infty} \frac{1}{S} \sum_{p=1}^S \langle \psi_p | A \psi_p \rangle = E(|c|^2) Tr A = E(|c|^2) \sum_{n=1}^D \langle \varphi_n | A \varphi_n \rangle \quad (2.44)$$

dengan  $E(|c|^2)$  merupakan harga harap dari distribusi kebolehhadian yang digunakan untuk membangkitkan bilangan acak  $a_i$ .

Sehingga persamaan rapat keadaan dapat ditulis sebagai:

$$D(\varepsilon) = \lim_{S \rightarrow \infty} \frac{1}{S} \sum_{p=1}^S \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{it\varepsilon} \langle \psi(0) | e^{-itH} | \psi(0) \rangle dt \quad (2.45)$$

dengan fungsi korelasi  $\langle \psi(0) | e^{-itH} | \psi(0) \rangle$  sebanyak  $S$  sampling yang merupakan *inner product* antara keadaan awal dengan keadaan setelah adanya perubahan waktu  $\tau$ .

#### 2.2.4 Perhitungan Rapat Keadaan

Rapat keadaan merupakan jumlah keadaan per interval energi pada tiap tingkat energi yang tersedia. Persamaan rapat keadaan secara diskrit bisa dihasilkan dari transformasi Fourier. Menurut Hafner (2011), persamaan tersebut didapatkan dengan transformasi Fourier dari angka 1, sehingga:

$$FT(1) = \delta(\varepsilon) \quad (2.46)$$

$$\delta(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{it\varepsilon} dt \quad (2.47)$$

Dengan menggunakan kaitan tersebut, maka persamaan rapat keadaan diskrit dapat ditulis sebagai:

$$D(\varepsilon) = \sum_{n=1}^D \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{it\varepsilon} e^{-itE_n} dt \quad (2.48)$$

Jika  $Tr e^{itH} = \sum_{n=1}^D e^{-itE_n}$  dan  $Tr e^{itH} = \sum_{n=1}^D \langle \varphi_n | e^{-itH} | \varphi_n \rangle$ , maka nilai rapat keadaan dapat dihitung dengan melakukan sampling sebanyak  $S$  dari keadaan awal  $|\psi(0)\rangle$  yang merupakan superposisi acak dari keadaan basis (8):

$$|\psi(0)\rangle = \sum_i a_i |i\rangle \quad (2.49)$$

dengan  $a_i$  merupakan bilangan kompleks dan  $|i\rangle$  adalah keadaan basis sehingga keadaan awal  $|\psi(0)\rangle$  merupakan sebuah vektor yang berisi bilangan kompleks. Sehingga untuk sampling sebanyak  $S$  suatu keadaan dapat ditulis (8):

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \frac{1}{s} \sum_{p=1}^s \langle \psi_p | A \psi_p \rangle = E(|c|^2) Tr A = E(|c|^2) \sum_{n=1}^D \langle \varphi_n | A \varphi_n \rangle \tag{2.50}$$

dengan  $E(|c|^2)$  merupakan harga harap dari distribusi kebolehhajian yang digunakan untuk membangkitkan bilangan acak  $a_i$ .

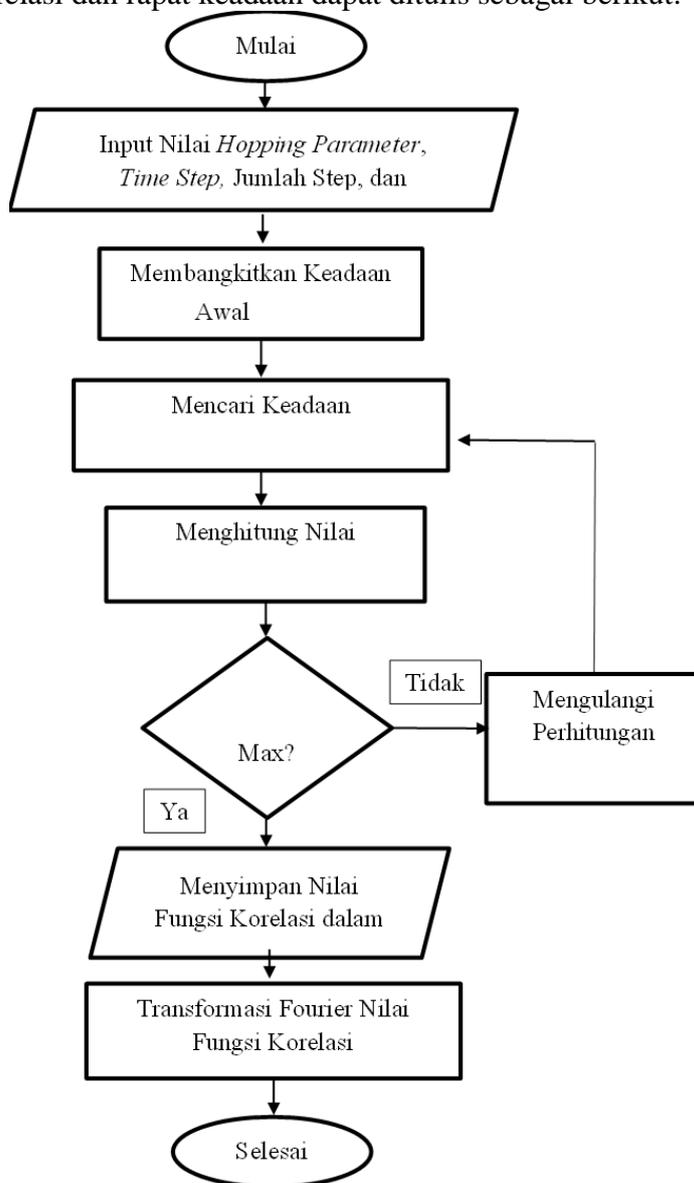
Sehingga persamaan rapat keadaan dapat ditulis sebagai:

$$D(\varepsilon) = \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{1}{s} \sum_{p=1}^s \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{it\varepsilon} \langle \psi(0) | e^{-itH} | \psi(0) \rangle dt \tag{2.51}$$

dengan fungsi korelasi  $\langle \psi(0) | e^{-itH} | \psi(0) \rangle$  sebanyak  $S$  sampling yang merupakan *inner product* antara keadaan awal dengan keadaan setelah adanya perubahan waktu  $\tau$ .

### 2.3 Perhitungan Fungsi Korelasi dan Rapat Keadaan

Ariasoca (2018) telah melakukan perhitungan fungsi korelasi untuk sistem *graphene monolayer* menggunakan langkah waktu ( $\Delta\tau$ ) sebesar 0,02 s dengan hasil yang mendekati perhitungan analitik. Maka akan dipilih besar langkah waktu yang sama karena merupakan besar langkah waktu yang optimum. Perhitungan rapat keadaan dilakukan dengan melakukan transformasi Fourier terhadap nilai fungsi korelasi yang telah dihitung sesuai dengan persamaan 2.45. Bagian real dari transformasi Fourier kemudian diplot untuk menghasilkan grafik rapat keadaan. Diagram alir perhitungan fungsi korelasi dan rapat keadaan dapat ditulis sebagai berikut:



Gambar 5. Diagram alir perhitungan fungsi korelasi dan rapat keadaan

### III. HASIL DAN PEMBAHASAN

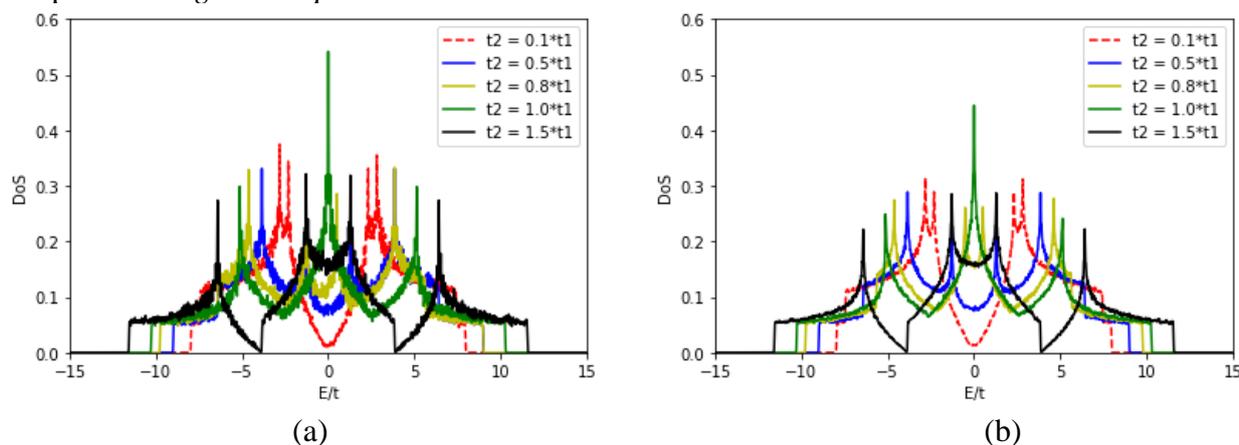
Berdasarkan pada penggunaan model *tight-binding* dalam perhitungan rapat keadaan, terdapat beberapa parameter yang berpengaruh. Parameter tersebut antara lain ukuran sistem dan *hopping parameter* ( $-t$ ). *Hopping parameter* diartikan sebagai tenaga yang dibutuhkan oleh sebuah elektron untuk berpindah dari satu atom menuju atom terdekatnya. Jika dilihat berdasarkan struktur kristal yang digambarkan pada Gambar 1.1, maka nilai dari ( $-t$ ) merupakan energi yang dibutuhkan untuk berpindah dari satu site menuju site tetangga terdekatnya. Pada graphene *bilayer* terdapat dua *hopping parameter*, yaitu *hopping parameter* pada satu lapisan ( $-t_1$ ) dan *hopping parameter* antar layer ( $-t_2$ ).

Setelah menentukan parameter-parameter model *tight-binding*, model Hamiltoniannya dinyatakan dalam bentuk matriks dengan ukuran sesuai dengan ukuran sistem yang akan ditinjau. Matriks tersebut kemudian didekomposisi menggunakan metode Trotter-Suzuki agar proses perhitungan dapat dilakukan dengan mudah dengan ongkos komputasi yang kecil. Proses perkalian matriks bertujuan untuk memperoleh fungsi korelasi sebagai hasil kali antara konjugat kompleks fungsi gelombang awal dengan fungsi gelombang setelah dikenai operator *time evolution*. Rapat keadaan didapatkan dengan melakukan transformasi Fourier dari nilai real fungsi korelasi yang telah dihitung.

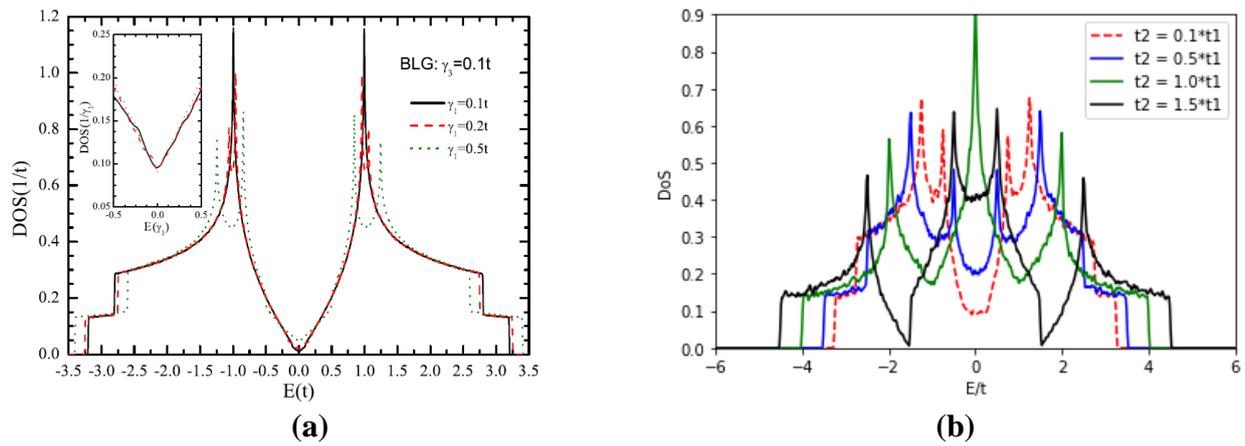
#### 3.1 Variasi Ukuran Sistem

Perhitungan pertama adalah dengan menghitung rapat keadaan dari material *graphene bilayer* dengan ukuran sistem  $256 \times 256$  dan  $512 \times 512$ . Hasil perhitungan tersebut akan dibandingkan dengan hasil perhitungan dari (13) yang menggunakan metode Chebyshev. Gambar 3.1 (a) menunjukkan rapat keadaan dari *graphene* dengan ukuran  $256 \times 256$  dan Gambar 3.1 (b) untuk ukuran  $512 \times 512$ . Berdasarkan gambar 3.1 (a) dan 3.1 (b), dapat dilihat bahwa untuk ukuran sistem yang lebih kecil akan mengakibatkan ketidakakuratan rapat keadaan yang dihasilkan. Semakin besar ukuran sistem, maka akan semakin akurat juga nilai rapat keadaan yang dihasilkan

Jika dibandingkan dengan gambar 3.2 yang merupakan perhitungan dengan metode yang berbeda, maka untuk ukuran sistem yang lebih besar akan mendekati hasil perhitungan tersebut. Hal ini menunjukkan bahwa hasil kalkulasi dengan metode rambatan waktu Trotter-Suzuki dapat digunakan untuk menghitung nilai rapat keadaan. Berdasarkan perbandingan gambar 3.2 (b) dan 3.3 menunjukkan bahwa untuk ukuran sistem yang berbeda jauh, hasil perhitungan DOS-nya hampir mendekati. Hal ini juga menunjukkan bahwa metode Trotter-Suzuki lebih efektif digunakan dalam menghitung DOS walaupun dengan ukuran sistem yang tidak terlalu besar sehingga dapat memperkecil *ongkos komputasi*.



Gambar 6. Rapat keadaan *graphene bilayer* dengan  $-t_1 = 2.57eV$ ; ukuran sistem (a)  $256 \times 256$  (b)  $512 \times 512$

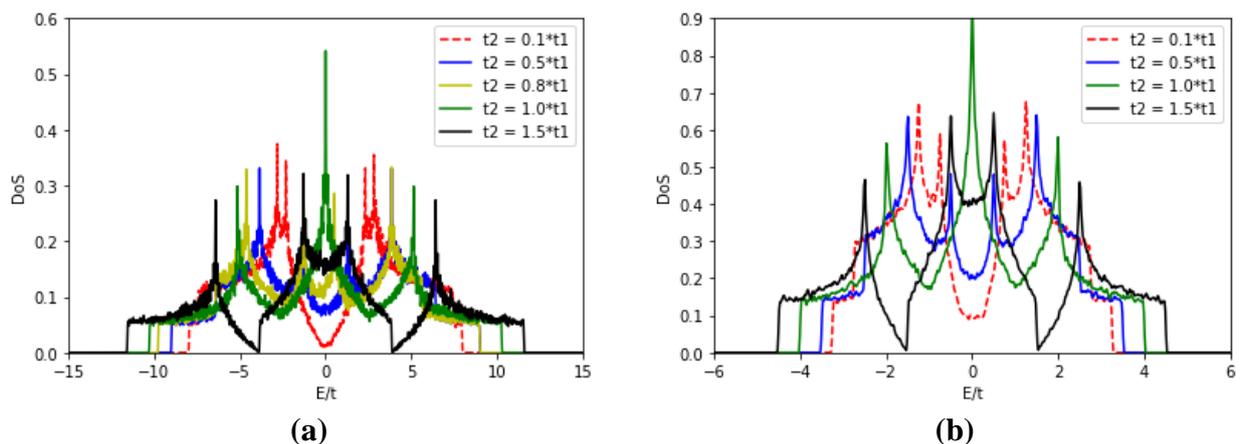


Gambar 7. Perbandingan DOS dari *graphene bilayer* dengan variasi  $-t_2$  untuk ukuran atom (a)  $4096 \times 4096$  (b)  $256 \times 256$

### 3.2 Variasi Hopping parameter

Telah dilakukan perhitungan rapat keadaan dengan pengubahan beberapa nilai dari *hopping parameter*, baik itu ( $-t_1$ ) maupun ( $-t_2$ ) dengan ukuran sistem yang sama, yaitu  $256 \times 256$ . Berdasarkan gambar 3.3 (a) dan 3.3 (b) maka dapat dilihat bahwa untuk variasi nilai  $-t_1$  berpengaruh pada lebar energi yang ditempati oleh keadaan-keadaan material yang diteliti. Semakin besar nilai  $-t_1$ , maka semakin lebar pula energi yang ditempati oleh keadaan-keadaan material yang diteliti.

Variasi  $-t_2$  menghasilkan grafik DOS yang menarik. Dalam hal ini bisa kita lihat pada gambar 3.3 (b). Perhitungan rapat keadaan diperoleh dengan memvariasi nilai  $-t_2$  sebesar  $0.2 \times t_1$ ,  $0.5 \times t_1$ ,  $0.8 \times t_1$ ,  $1.0 \times t_1$ , dan  $1.5 \times t_1$ . Nilai variasi  $-t_2$  dapat dikelompokkan menjadi 3 bagian yaitu,  $-t_2 < -t_1$ ,  $-t_2 = -t_1$ , dan  $-t_2 > -t_1$ . Untuk nilai  $-t_2 < -t_1$ , dihasilkan DOS dari *graphene bilayer* yang hasilnya hampir sama dengan perhitungan menggunakan metode lain. Seperti yang sudah dijelaskan sebelumnya. Untuk  $-t_2 = -t_1$ , ada singularitas di tenaga Fermi. Sedangkan untuk  $-t_2 > -t_1$  menunjukkan bahwa sifat metalicity yang semakin baik, ditunjukkan dengan nilai DOS yang cukup tinggi di tingkat tenaga Fermi.



Gambar 8. Rapat keadaan *graphene bilayer* dengan ukuran  $256 \times 256$  dengan (a)  $-t_1 = 2.57$  (b)  $-t_1 = 1.0$

## IV. SIMPULAN DAN SARAN

### 4.1 Simpulan

Berdasarkan penelitian yang dilakukan, diperoleh kesimpulan sebagai berikut 1) Struktur elektronik *graphene bilayer* didekati dengan model *tight-binding* dapat menjelaskan material *graphene bilayer*. 2) Rapat keadaan material *graphene bilayer* didapatkan dan bisa menggambarkan

fase material *graphene bilayer*. 3) Metode Trotter-Suzuki dapat digunakan sebagai cara untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger gayut waktu yang diimplementasikan pada material *graphene bilayer*. 4) Variasi nilai  $-t_1$  berpengaruh pada lebar energi yang ditempati oleh keadaan-keadaan material dan variasi nilai  $-t_2$  berpengaruh pada nilai DOS di tingkat tenaga Fermi.

#### 4.2 Saran

Diharapkan dapat menggunakan ukuran sistem yang lebih besar dan menggunakan metode Trotter-Suzuki untuk menghitung rapat keadaan atau konduktivitas optik untuk material yang lain.

### DAFTAR PUSTAKA

1. Zhu YW, Murali S, Cai WW, Li XS, Suk JW, Potts JR, et al. Graphene and graphene oxide: synthesis, properties and applications. *Adv Mater*. 2010 Jan 1;20:1–19.
2. Castro Neto AH, Guinea F, Peres NMR, Novoselov KS, Geim AK. The electronic properties of graphene. *Rev Mod Phys* [Internet]. 2009 Jan 14;81(1):109–62. Available from: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.81.109>
3. Bonaccorso F, Sun Z, Hasan T, Ferrari AC. Graphene photonics and optoelectronics. *Nat Photonics* [Internet]. 2010;4(9):611–22. Available from: <https://doi.org/10.1038/nphoton.2010.186>
4. McCann E, Koshino M. The electronic properties of bilayer graphene. *Reports on Progress in Physics* [Internet]. 2013;76(5):056503. Available from: <https://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/76/5/056503>
5. Rozhkov A V, Sboychakov AO, Rakhmanov AL, Nori F. Electronic properties of graphene-based bilayer systems. *Phys Rep* [Internet]. 2016;648:1–104. Available from: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157316301612>
6. Uppstu A. Electronic properties of graphene from tight-binding simulations [Doctoral thesis]. Aalto University; 2014.
7. Alben R, Blume M, Krakauer H, Schwartz L. Exact results for a three-dimensional alloy with site diagonal disorder: comparison with the coherent potential approximation. *Phys Rev B* [Internet]. 1975 Nov 15;12(10):4090–4. Available from: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.12.4090>
8. De Raedt H. Product formula algorithms for solving the time dependent Schrödinger equation. *Computer Physics Reports* [Internet]. 1987;7(1):1–72. Available from: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0167797787900025>
9. Yuan S, De Raedt H, Katsnelson MI. Modeling electronic structure and transport properties of graphene with resonant scattering centers. *Phys Rev B* [Internet]. 2010 Sep 28;82(11):115448. Available from: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.115448>
10. Häfner V, Evers Korreferent F, Busch Prüféxemplar K. Large scale simulation of wave-packet propagation via Krylov subspace methods and application to graphene Simulation von Wellenpaketen mit Krylov-Methoden und Anwendung auf Graphen. 2011.
11. Dhand I, Sanders BC. Stability of the Trotter–Suzuki decomposition. *J Phys A Math Theor* [Internet]. 2014;47(26):265206. Available from: <https://dx.doi.org/10.1088/1751-8113/47/26/265206>
12. Ariasoca TA, Sholihun, Santoso I. Trotter-Suzuki-time propagation method for calculating the density of states of disordered graphene. *Comput Mater Sci*. 2019;

13. Yuan S, De Raedt H, Katsnelson MI. Electronic transport in disordered bilayer and trilayer graphene. *Phys Rev B* [Internet]. 2010 Dec 6;82(23):235409. Available from: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.235409>
14. Dietl P. Numerical studies of electronic transport through Graphene nanoribbons with disorder. Karlsruhe Institute of Technology. 2009;
15. De Raedt H, De Raedt B. Applications of the generalized Trotter formula. *Phys Rev A (Coll Park)* [Internet]. 1983 Dec 1;28(6):3575–80. Available from: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.28.3575>
16. Suzuki M. Generalized Trotter's formula and systematic approximants of exponential operators and inner derivations with applications to many-body problems. *Commun Math Phys*. 1976;51(2):183–90.