



INTISARI

PERHITUNGAN NUMERIK KONDUKTIVITAS OPTIK MATERIAL GRAPHENE DENGAN MODEL IKATAN KUAT PERAMBATAN WAKTU MELALUI PENDEKATAN TROTTER-SUZUKI

Oleh

Giovanni Mahendra
16/398444/PA/17405

Telah dilakukan perhitungan konduktivitas optik material graphene lapisan tunggal dua dimensi menggunakan model ikatan kuat melalui penyelesaian persamaan Schrödinger gayut waktu dengan metode perambatan waktu Trotter-Suzuki. Perhitungan numerik dengan metode Trotter-Suzuki digunakan sebagai alternatif ongkos komputasi yang lebih kecil, dan model ikatan kuat yang memperhitungkan tetangga terdekat dari atom yang ditinjau. Graphene yang memiliki struktur heksagonal diubah menjadi struktur *brick lattice*, lalu dibangkitkan bilangan acak antara -1 dan 1 sebagai fungsi gelombang awal dari tiap-tiap atom. Dilakukan terlebih dahulu perhitungan rapat arus serta fungsi distribusi fermi-dirac, menggunakan parameter hopping $t = 1$ eV. Ditemukan puncak pada $\omega/t = 2$ yang terjadi saat dilakukan pengujian diberbagai frekuensi.

Kata Kunci: graphene, konduktivitas optik, model ikatan kuat, Trotter-Suzuki, persamaan Schrödinger gayut waktu.



ABSTRACT

***NUMERICAL CALCULATION OF OPTICAL CONDUCTIVITY
OF GRAPHENE MATERIAL USING TIGHT BINDING
PROPAGATION METHOD WITH TROTTER-SUZUKI
APPROXIMATION***

By

Giovanni Mahendra
16/398444/PA/17405

A computational study has been carried out to calculate optical conductivity of graphene monolayer two dimensional material using tight binding model through the solution of time dependent Schrödinger equation with Trotter-Suzuki time propagation method. Trotter-Suzuki method is used to minimize the computational cost, and the tight binding model consider the atom nearest neighbor. Graphene has hexagonal structure that changed into brick lattice structure, then the wave function is used the random number between -1 and 1 for each atom. The first thing to calculate is current density and fermi-dirac distribution function, using hopping parameter $t = 1$ eV. We obtain the peak occur at $\omega/t = 2$ that happened when calculated over the frequency range.

Keywords: graphene, optical conductivity, tight binding model, Trotter-Suzuki, time dependent Schrödinger equation.