KECENDERUNGAN LOKALISASI ANDERSON DAN SIFAT ELEKTRONIK-OPTIK DI SISTEM TWISTED BILAYER GRAPHENE
AMBIPOLAR-30Â°: KAJIAN TIGHT-BINDING TIME PROPAGATION TROTTERâ€“SUZUKI
Riski Nurhidayah, Dr. Iman Santoso S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN iii
PERNYATAAN iv
MOTTO DAN PERSEMBAHAN v
PRAKATA vi
DAFTAR ISI viii
DAFTAR GAMBAR xi
DAFTAR TABEL xiv
INTISARI xv
ABSTRAK xvi
BAB 1 PENDAHULUAN 1
1.1 Latar Belakang 1
1.2 Rumusan Masalah 8
1.3 Batasan Masalah 8
1.4 Tujuan Penelitian 9
1.5 Manfaat Penelitian 10
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA 11
BAB 3 LANDASAN TEORI 19
3.1 Struktur Geometri dan Kisi Sistem *Graphene* 19
3.1.1 *Monolayer Graphene* 19
3.1.2 *Bilayer Graphene* 23
3.1.3 *Twisted Bilayer Graphene* Sudut 30° 27
3.2 Metode *Tight-Binding* 29
3.2.1 Persamaan *Secular* 30
3.2.2 Persamaan Kuantisasi Kedua 35

KECENDERUNGAN LOKALISASI ANDERSON DAN SIFAT ELEKTRONIK-OPTIK DI SISTEM TWISTED BILAYER GRAPHENE
AMBIPOLAR-30Â°: KAJIAN TIGHT-BINDING TIME PROPAGATION TROTTERâ€“SUZUKI
Riski Nurhidayah, Dr. Iman Santoso S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

3.3 *Time Dependent Schrödinger Equation* 37
3.4 Metode Trotter Suzuki 40
3.5 *Density of States* (DOS) 43
3.6 Konduktivitas Optik 44
3.7 Lokalisasi Anderson 47
BAB 4 METODE PENELITIAN 50
4.1 Alat dan Bahan Penelitian 50
4.2 Waktu dan Tempat Penelitian 50
4.3 Prosedur Penelitian 50
4.3.1 Parameter Simulasi dan Validasi 53
4.3.2 Penyusunan Matriks Hamiltonian *Tight Binding* 54
4.3.3 Implementasi Metode Dekomposisi Matriks *Trotter-Suzuki* 60
4.3.4 Perhitungan Propagasi Waktu TDSE 62
4.3.5 Perhitungan Density of States 63
4.3.6 Perhitungan Konduktivitas Optik 64
4.3.7 Perhitungan Lokalisasi Anderson 66
BAB 5 HASIL DAN PEMBAHASAN 67
5.1 Parameter dan Validasi Simulasi 67
5.1.1 *Graphene* Murni 67
5.1.2 *Monolayer Graphene* Terdoping Boron dan Nitrogen 69
5.1.3 *Bilayer Graphene* Terdoping Boron dan Nitrogen 71
5.2 Perhitungan Rapat Keadaan dengan *Vacancy Disorder* 73
5.3 Perhitungan Inverse Participation Ratio 82
5.3.1 Noncorrelated Disorder 82
5.3.2 Correlated Disorder 83
5.4 Perhitungan Konduktivitas Optik 87

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
KECENDERUNGAN LOKALISASI ANDERSON DAN SIFAT ELEKTRONIK-OPTIK DI SISTEM TWISTED BILAYER GRAPHENE AMBIPOLAR-30Â°: KAJIAN TIGHT-BINDING TIME PROPAGATION TROTTERâ€“SUZUKI
Riski Nurhidayah, Dr. Iman Santoso S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

BAB 6 PENUTUP 93

6.1 KESIMPULAN 93

6.2 SARAN 94

DAFTAR PUSTAKA 95

LAMPIRAN 101

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
KECENDERUNGAN LOKALISASI ANDERSON DAN SIFAT ELEKTRONIK-OPTIK DI SISTEM TWISTED BILAYER GRAPHENE
AMBIPOLAR-30Â°: KAJIAN TIGHT-BINDING TIME PROPAGATION TROTTERâ€“SUZUKI
Riski Nurhidayah, Dr. Iman Santoso S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Hasil numerik untuk kerapatan keadaan (density of states, DOS) dengan pengaruh disorder yang terdistribusi acak (gaussian noncorrelated) yaitu (a) disorder potensial (b) disorder hopping, dan disorder yang terdistribusi berbentuk kluster (gaussian correlated) (c) disorder potensial (d) disorder hopping, Yuan dkk. (2011)..... 13

Gambar 3.1 Struktur kristal monolayer graphene pada ruang riil dan (b) struktur kisi balik (reciprocal lattice) (Castro Neto dkk., 2009). 19

Gambar 3.2 (a) Density of states pada monolayer graphene, (b) dispersi energi pada kisi honeycomb (Wang dkk., 2019). 22

Gambar 3.3 Ilustrasi sistem bilayer graphene dengan konfigurasi AA stacking (Rozhkov dkk., 2016). 24

Gambar 3.4 Ilustrasi sistem bilayer graphene dengan konfigurasi AB stacking (Rozhkov dkk., 2016). 25

Gambar 3.5 Density of states untuk (a) bilayer graphene dengan AA stacking dan (b) bilayer graphene dengan AB stacking. 26

Gambar 3.6 Struktur geometri twisted bilayer graphene 30° (Yu dkk, 2019). 27

Gambar 4.1 Diagram alir penelitian. 52

Gambar 4.2 Pendekatan kisi brickwall dari kisi honeycomb pada graphene..... 55

Gambar 4.3 Bilayer Twisted Graphene sudut 30°. 58

Gambar 4.4 Graphene dengan doping substitusi atom Boron atau Nitrogen yang menempati subkisi B. 59

Gambar 4.5 Pemodelan vakansi terdistribusi Gaussian (a) acak (noncorrelated disorder) dan (b) berbentuk kluster (correlated disorder)..... 60

Gambar 4.6 Diagram alir perhitungan metode perambatan waktu (time propagation)..... 63

Gambar 5.1 Density of States sistem twisted bilayer graphene 30°dengan variasi ukuran sistem 256×256, 512×512, dan 1024×1024. 68

Gambar 5.2 DOS sistem TBG 30°dengan variasi NSTEP 16384, 32768, 65536.69

Gambar 5.3 a) Struktur pita hasil perhitungan DFT dan (b) DOS monolayer graphene terdoping boron substitusional. 70

KECENDERUNGAN LOKALISASI ANDERSON DAN SIFAT ELEKTRONIK-OPTIK DI SISTEM TWISTED BILAYER GRAPHENE
AMBIPOLAR-30Â°: KAJIAN TIGHT-BINDING TIME PROPAGATION TROTTERâ€“SUZUKI
Riski Nurhidayah, Dr. Iman Santoso S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

Gambar 5.4 (a) Struktur pita hasil perhitungan DFT dan (b) DOS monolayer graphene terdoping nitrogen substitusional 71
Gambar 5.5 DOS sistem TBG 30° dengan nilai faktor skala a divariasikan 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 1.0, dan 1.5. 72
Gambar 5.6 Distribusi vacancy (a) Noncorrelated disorder dan (b) correlated disorder 74
Gambar 5.7 DOS sistem TBG 30° murni dengan vacancy yang terdistribusi (a) noncorrelated disorder (b) correlated disorder pada berbagai konsentrasi vacancy 0%-10%. 75
Gambar 5.8 DOS sistem TBG 30° terdoping boron dan nitrogen dengan noncorrelated vacancy disorder pada berbagai konsentrasi vacancy 0%-50%. 76
Gambar 5.9 DOS sistem TBG 30° terdoping boron dan nitrogen dengan correlated vacancy disorder (σ = 5) pada berbagai konsentrasi vacancy 0%-50%. 77
Gambar 5.10 DOS sistem TBG 30° terdoping boron dan nitrogen dengan correlated vacancy disorder pada konsentrasi vacancy 5% untuk berbagai nilai $\sigma = 1.0, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0$ 78
Gambar 5.11 DOS sistem TBG 30° terdoping boron dan nitrogen pada nilai a = 1,0 dengan (a) noncorrelated disorder dan (b) correlated disorder pada konsentrasi vacancy 0%, 5%, dan 10%. 79
Gambar 5.12 DOS sistem TBG 30° terdoping boron dan nitrogen pada nilai a = 1,5 dengan (a) noncorrelated disorder dan (b) correlated disorder pada konsentrasi vacancy 0%, 5%, dan 10%. 80
Gambar 5.13 Inverse Paticipation Ratio dari sistem graphene terdoping (a) Boron pada layer bawah, (b) Nitrogen pada layer atas, (c) twisted bilayer 30°, dengan vacancy 5% terdistribusi noncorrelated disorder 82
Gambar 5.14 IPR dari sistem graphene terdoping (a) Boron pada layer 1, (b) Nitrogen pada layer 2, (c) twisted bilayer 30° terdistribusi correlated disorder dengan σ = 5, dan vacancy 5%. 84

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
KECENDERUNGAN LOKALISASI ANDERSON DAN SIFAT ELEKTRONIK-OPTIK DI SISTEM TWISTED BILAYER GRAPHENE
AMBIPOLAR-30Â°: KAJIAN TIGHT-BINDING TIME PROPAGATION TROTTERâ€“SUZUKI
Riski Nurhidayah, Dr. Iman Santoso S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

Gambar 5.15 IPR dari sistem graphene terdoping (a) Boron pada layer 1, (b) Nitrogen pada layer 2, (c) twisted bilayer 30° terdistribusi correlated disorder dengan σ = 5, dan vacancy 10%. 85
Gambar 5.16 IPR dari sistem graphene terdoping (a) Boron pada layer 1, (b) Nitrogen pada layer 2, (c) twisted bilayer 30° terdistribusi correlated disorder dengan σ = 5, dan vacancy 20%. 86
Gambar 5.17 Konduktivitas Optik Pada twisted bilayer graphene 30° 88
Gambar 5.18 Konduktivitas Optik dari twisted bilayer 30° dengan vacancy yang terdistribusi noncorrelated disorder yang divariasikan 0%-10%... 89
Gambar 5.19 Konduktivitas Optik dari twisted bilayer 30° dengan vacancy yang terdistribusi correlated disorder yang divariasikan 0%-10%..... 90

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
KECENDERUNGAN LOKALISASI ANDERSON DAN SIFAT ELEKTRONIK-OPTIK DI SISTEM TWISTED BILAYER GRAPHENE
AMBIPOLAR-30Â°: KAJIAN TIGHT-BINDING TIME PROPAGATION TROTTERâ€“SUZUKI
Riski Nurhidayah, Dr. Iman Santoso S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

DAFTAR TABEL

Tabel 5.1 Parameter tight binding berupa nilai onsite dan hopping antar atom. .. 70

Tabel 5.2 Parameter tight binding berupa nilai hopping interlayer. 72