

INTISARI

Tinjauan Numerik Rapat Keadaan Graphene Layer Ganda dengan Untiran pada Energi Rendah Menggunakan Metode Newton Raphson

Oleh

Ilham Pebrika

10/305455/PA/13520

Telah dilakukan perhitungan secara numerik terhadap rapat keadaan pada graphene *Layer* ganda dengan untiran, dimana pada kajian ini salah satu lembaran mengalami beberapa variasi sudut untiran (θ) yakni sebesar $1,16^0$, $1,79^0$, dan $3,48^0$. Rapat keadaan dihitung berdasarkan persamaan energi dispersi $E(\vec{k})$ pada energi rendah. Pada umumnya rapat keadaan dihitung secara numerik menggunakan persamaan $N(E) = N_f \sum_k \delta(E - E(k))$, yakni ketika posisi $\varepsilon = E(k)$ dengan N_f merupakan faktor degenerasi. Nilai $N(E)$ dikelompokkan berdasarkan nilai-nilai yang hampir sama yang kemudian dijumlahkan menjadi nilai rapat keadaan. Hanya saja metode ini memiliki ralat yang lebih besar karena nilai $N(\varepsilon)$ yang diperoleh dianggap sama dengan nilai yang terdekat. Pada kajian ini nilai rapat keadaan dihitung dengan metode yang berbeda yakni mengimplementasikan nilai $\varepsilon = E(k)$ tetapi dengan pendekatan nilai yang mendekati nilai yang sebenarnya. Nilai tersebut direpresentasikan dengan nilai akar-akar dari persamaan energi dispersi dikurangi nilai level energi E sebagai fungsi pembuat nol ($E(k) - E$). Nilainya dapat dihitung dengan metode *Newton-Raphson*. Nilai akar ini kemudian diidentifikasi dengan nilai 1 dan dijumlahkan per level energi E sehingga setiap levelnya memiliki nilai rapat keadaan yang telah dijumlahkan berdasarkan banyak akar yang ada. Dari grafik rapat keadaan, diperoleh informasi nilai rapat keadaan pada posisi SVH untuk tiap untiran, yakni iga sudut untiran, diperoleh nilai DOS pada SVH yakni $1,5 \cdot 10^{25} \text{ eV}^{-1} \text{ m}^{-2}$, $2,8 \cdot 10^{25} \text{ eV}^{-1} \text{ m}^{-2}$, dan $11 \cdot 10^{25} \text{ eV}^{-1} \text{ m}^{-2}$, Energi pada Singularitas Van-Hove (SVH), $\pm 6 \text{ meV}$, $\pm 41 \text{ meV}$, $\pm 215 \text{ meV}$ dari titik Dirac. Nilai kecepatan *Fermi* (v_f) yang direpresentasikan dengan nilai gradien (m) pada pola linear dari grafik DOS, yakni $0,21 \cdot 10^{25} \text{ eV}^{-2} \text{ m}^{-2}$, $0,8 \cdot 10^{25} \text{ eV}^{-2} \text{ m}^{-2}$ dan $4,3 \cdot 10^{25} \text{ eV}^{-2} \text{ m}^{-2}$, menggambarkan renormalisasi kecepatan fermi yang terkait dengan adanya interaksi yang berhubungan dengan parameter energi lompatan. Nilai parameter ini merupakan nilai faktor energi yang dibutuhkan bagi elektron untuk berpindah antar layer dimana besar nilainya $5,38 \text{ meV}$, $39,93 \text{ meV}$, dan $209,35 \text{ meV}$.

Kata-kata kunci :Graphene, Energi Dispersi, Rapat Keadaan.

ABSTRACT

Numerical Consideration of Density of state Of Twisted Bilayer Graphene at Low Energy Using Newton Raphson method

By

Ilham Pebrika

10/305455/PA/13520

The Numerical Computation of Density Of States of Twisted Bilayer Graphene (TBG) has been carried out. TBG that consist of two layer graphene with one layer is twisted with respect to other layer. In this study the twisted angles (θ) are chosen to be 1.16° , 1.79° , and 3.48° . Calculation of *Density of States* (DOS) based on energy dispersion ($E(\vec{k})$) at low energy. Generally calculation of DOS using numerically methods using $N(E) = N_f \sum_k \delta(E - E(k))$ equation, that at $\varepsilon = E(k)$ with N_f is factor of degeneration. The values of $N(E)$ has been included in nearly equal values and has been summed be a DOS. This method be possessed of large errors because the values of $N(E)$ acquired same with closest values. In this study the values of DOS is calculated using different method that is implementation of true values. it can be represented using the values of root from energy dispersion minus values of level energy be a zero maker equation ($E(k) - E$). it can be calculated using Newton-Raphson method. Next the values of root is identified by one unit and summed per level energy E , with the result that every level be possessed of DOS based by summing all roots. From graphics of DOS we can get information about values of DOS, at SVH for each twisted angle are $1.5 \cdot 10^{25} \text{ eV}^{-1} \text{ m}^{-2}$, $2.8 \cdot 10^{25} \text{ eV}^{-1} \text{ m}^{-2}$, and $11 \cdot 10^{25} \text{ eV}^{-1} \text{ m}^{-2}$, Energy at Singularitas Van-Hove points are $\pm 6 \text{ meV}$, $\pm 41 \text{ meV}$, and $\pm 215 \text{ meV}$, from the Dirac point. The results of the values of fermi velocity whose values has been represented by gradien (m) of linearity pattern at DOS graphics are $0.21 \cdot 10^{25} \text{ eV}^{-2} \text{ m}^{-2}$, $0.8 \cdot 10^{25} \text{ eV}^{-2} \text{ m}^{-2}$, and $4.3 \cdot 10^{25} \text{ eV}^{-2} \text{ m}^{-2}$, for each each twisted angle respectively. it described renormalisation of Fermi velocity is concerned with interaction that related with flying jump of energy. This parameters is factor energy is needed to electron to migratory inter layer. Thats value are 5.38 meV , 39.93 meV , and 209.35 meV .

Keywords: Graphene, Dispersion Energy, Density Of States.