

DAFTAR ISI

Halaman Judul	i
Halaman Pengesahan	ii
Halaman Pernyataan	iii
Halaman Persembahan	iv
Halaman Motto	v
PRAKATA	vi
INTISARI	xvii
ABSTRACT	xviii
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Batasan Masalah	5
1.3 Tujuan Penelitian	5
1.4 Tinjauan Pustaka	6
1.5 Metode Penelitian	10
1.6 Sistematika Penulisan	13
II Landasan Teori	14
2.1 Struktur Kristal dan sifat elektronik Graphene Monolayer	14
2.1.1 Struktur Ruang Real	14
2.1.2 Kisi Balik (<i>Reciprocal Lattice</i>) Graphene	15
2.1.3 Metode ikatan kuat (<i>Tight Binding</i>) Monolayer Graphene	15
2.2 Struktur Kristal dan sifat elektronik Bilayer Graphene	18
2.2.1 Tumpukan AB	18
2.2.2 Tumpukan AA	20
2.3 Struktur Kristal dan sifat elektronik <i>Twisted Bilayer Graphene</i>	23
2.3.1 Struktur Kristal pada <i>Twisted bilayer Graphene</i>	23

2.3.2	Model Hamiltonan dan Energi Dispersi Twisted Bilayer Grapene	26
2.3.3	Rapat Keadaan (<i>Density of State</i>) Graphene Layer Tunggal (<i>Graphene Monolayer</i>)	28
2.3.4	Rapat Keadaan (DOS) Twisted Bilayer Grapene	29
2.4	<i>Low – Energy</i> SVH dan renormalisasi Kecepatan fermi (v_f)	30
2.5	Metode penentuan nilai akar-akar Newton-Raphson (NR)	32
2.5.1	Perhitungan nilai ralat pada metode Newton-Raphson	33
III	Hasil dan Pembahasan	36
3.1	Analisa Hasil Perhitungan Numerik Rapat Keadaan (DOS) untuk graphene Monolayer Menggunakan metode Newto Raphson	36
3.2	Analisa Hasil Perhitungan Numerik Rapat Keadaan (DOS) untuk graphene Layer Ganda dengan untiran (<i>Twisted Bilayer Graphene</i>) Untuk Sudut Untiran $\theta = 1, 16^\circ$	41
3.3	Analisa Hasil Perhitungan Numerik Rapat Keadaan (DOS) untuk graphene Layer Ganda dengan untiran (<i>Twisted Bilayer Graphene</i>) Untuk Sudut Untiran $\theta = 1, 79^\circ$	44
3.4	Analisa Hasil Perhitungan Numerik Rapat Keadaan (DOS) untuk graphene Layer Ganda dengan untiran (<i>Twisted Bilayer Graphene</i>) Untuk Sudut Untiran $\theta = 3, 48^\circ$	45
3.5	Analisa nilai SVH dan Renormalisasi Kecepatan Fermi dari nilai DOS pada TBG pada Sudut Untiran $\theta = 1, 16^\circ$, $\theta = 1, 79^\circ$, dan $\theta = 3, 48^\circ$	48
IV	PENUTUP	53
4.1	Kesimpulan	53
4.2	Saran	54
A	Lampiran Perhitungan dan Syntac Menggunakan Matlab	58
1.1	Perhitungan nilai kesetaraan gradien (β), Vektor Pergeseran ΔK , Luasan dari sel satuan (<i>Unit Cell</i>) pada TBG, dan faktor lompatan energi t^θ	58
1.1.1	Perhitungan nilai kesetaraan gradien (β) antara nilai gradien pada grafik energi dispersi (m_d) dan gradien pada DOS (m_D)	58

1.1.2	Perhitungan nilai Vektor Pergeseran ΔK untuk sudut untiran $\theta = 1,16^\circ, \theta = 1,79^\circ$, dan $\theta = 1,48^\circ$	59
1.1.3	Perhitungan nilai Luasan dari sel satuan (<i>Unit Cell</i>) pada TBG sudut untiran $\theta = 1,16^\circ, \theta = 1,79^\circ$, dan $\theta = 1,48^\circ$.	60
1.1.4	Perhitungan nilai faktor lompatan energi t^θ untuk sudut untiran sudut untiran $\theta = 1,16^\circ, \theta = 1,79^\circ$, dan $\theta = 1,48^\circ$	60

DAFTAR GAMBAR

1.1	Struktur Kisi Hexagonal Graphene (Novoselov,2011)	2
1.2	Rapat muatan (DOS) yang dihitung dari energi dispersi Dengan variasi nilai $t'=0$ (atas) dan $t'=0.2$ (bawah)(t merupakan parameter lompatan atom terdekat dan t' parameter lompatan atom terdekat selanjutnya(Neto dkk,2009)	7
1.3	(atas)Dos untuk graphene monolayer menggunakan metode metode numerik pengembangan dari model TDSE (Yuan, 2010)(bawah)(a)Rapat muatan (DOS) Graphene layer tunggal(b)DOS Graphene layer Ganda tumpukan AA (b.1)Tanpa Symmetri dan (b.2)Dengan Symmetri(Tabert,2012)	8
1.4	(a)DOS Graphene layer ganda tumpukan AB (Tabert,2012) (b)DOS pada TBG dengan sudut untiran $\theta = 1,79^\circ, t_\perp = 0,24$ eV(Li dkk,2009)(bawah)DOS untuk variasi nilai sudut puntiran pada bilayer graphene $1,16^\circ, 1,79^\circ$, dan $3,48^\circ$ (Manaf,2014)	9
1.5	Bagan alir penggunaan metode Newton Raphson untuk menghitung DOS berdasarkan persamaan energi dispersi $E(\vec{k})$	11
1.6	Diagram alir penelitian	11
2.1	Struktur kristal sarang Lebah pada monolayer Graphene yang atom atomnya dilabeli dengan atom A(Warna Putih) dan B (warna Hitam)(Raza ,2012)	14
2.2	Kisi Balik Pada Graphene (atas)Zona Brilloun pada Graphene (bawah)(Raza,2012)	16
2.3	Energi dispersi dengan nilai $t = 3,033$ dan $t' = 0,29$ dilihat dari penampang tiga dan dua dimensi (Raza,2011)	17
2.4	Energi dispersi dengan $t' = 0$ dilihat dari penampang tiga dan dua dimensi (Raza,2011)	18
2.5	Tumpukan AB Graphene (Tabert,2012)	19
2.6	Struktur Pita Energi pada tumpukan AB Graphene tanpa gap dan dengan gap (Tabert,2012)	21
2.7	Tumpukan AA Graphene (Tabert,2012)	21
2.8	Struktur Pita Energi pada tumpukan AB Graphene(Tabert,2012)	23

2.9	(2.1(a))Struktur atom pada TBG dengan sudut untiran $\theta = 21.8^\circ$. (2.1(b))ZB pada TBG (Cocemasov, dkk,2013)	24
2.10	(Visualisasi luasan dari sel satuan (<i>unit sel</i>) pada TBG pada beragam sudut untiran (Moon dan Koshino,2012)	25
2.11	Dispersi Energi dengan sudut untiran $\theta = 10^\circ$ diperoleh menggunakan persamaan(2.3)	27
2.12	Dispersi Energi dengan sudut untiran $\theta = 1, 16^\circ$ (Manaf :2014)	28
2.13	Tunneling spectra untuk berbagai sudut untiran(Raza,2012)	31
2.14	Skema ilustrasi tahap untuk menemukan akar persamaan menggunakan methode Newton raphson (Pang, 2006)	32
3.1	(a)Grafik Energi Dispersi Graphene Layer Tunggal untuk nilai harap $t = 2, 8$ dan $t = 0$. (b)Grafik Energi Dispersi Graphene Layer Tunggal untuk parameter lompatan $t = 2, 8$ dan $t = 0$ pada saat nilai $K_x=0$ diperoleh dari persamaan energi dispersi(2,8).	36
3.2	Posisi <i>saddle point</i> (SP) pada energi dispersi untuk graphene monolayer	37
3.3	Variasi grafik DOS untuk graphene monolayer (c) $\Delta \vec{K}_x=0.05$ $E=0.05$ $\Delta \vec{K}_y=0.1$ Dengan variasi nilai parameter iterasi (n) 50,100,300, dan 500	38
3.4	Beberapa bentuk grafik DOS monolayer graphene (a) $\Delta \vec{K}_x=0.05$ $\Delta E=0.1$ $\Delta \vec{K}_y=0.1$ (b) $\Delta \vec{K}_x=0.1$ $\Delta E=0.05$ $\Delta \vec{K}_y=0.1$ (c) $\Delta \vec{K}_x=0.05$ $\Delta E=0.05$ $\Delta \vec{K}_y=0.1$ dan (d) Grafik DOS Monolayer dengan nilai ralat dan aproksimasi pola linear pada grafik DOS	39
3.5	(a)Grafik energi dispersi untuk nilai $\theta = 1, 16^\circ$ (b) grafik energi dispersi untuk nilai $\Delta K_x=0$ pada sudut untiran $\theta = 1, 16^\circ$ berdasarkan persamaan 2.32	41
3.6	Posisi <i>Saddle Point</i> (SP) pada energi dispersi pada TBG untuk sudut untiran $\theta = 1, 16^\circ$	42
3.7	Beberapa grafik DOS TBG untuk sudut untiran $\theta = 1, 16^\circ$ (a) $\Delta \vec{K}_x=0,0001$ $\Delta E=0,00005$ $\Delta \vec{K}_y=0,01$ (b) $\Delta \vec{K}_x=0,00005$ $\Delta E=0,00001$ $\Delta \vec{K}_y=0,01$ (c) $\Delta \vec{K}_x=0,00005$, $\Delta E=0,00005$ $\Delta \vec{K}_y=0,01$ (d)Grafik DOS TBG untuk sudut untiran $\theta = 1, 16^\circ$ dengan nilai ralat	43
3.8	(a)Grafik energi dispersi untuk nilai $\theta = 1, 79^\circ$ grafik energi dispersi dengan sudut untiran $\theta = 1, 79^\circ$ pada saat $\Delta K_x=0$	44

3.9	Posisi <i>Saddle Point</i> pada energi dispersi pada TBG untuk sudut untiran $\theta = 1,79^\circ$	45
3.10	Beberapa grafik DOS TBG untuk sudut untiran $\theta = 1,79^\circ$ (a) $\Delta \vec{K}_x=0,001$ $\Delta E=0,001$ $\Delta \vec{K}_y=0,001$ (b) $\Delta \vec{K}_x=0,0005$ $\Delta E=0,0005$ $\Delta \vec{K}_y=0,001$ (c) $\Delta \vec{K}_x=0,0001, \Delta E=0,0005$ $\Delta \vec{K}_y=0,001$ (d) Grafik DOS Monolayer dengan nilai ralat	46
3.11	(a) Grafik energi dispersi untuk nilai $\theta = 1,79^\circ$ grafik 3 Dimensi dan grafik 2 Dimensi (b) Grafik energi dispersi untuk nilai $\theta = 3,48^\circ$ (b) grafik energi dispersi untuk nilai $\Delta K_x=0$ pada sudut untiran $\theta = 3,48^\circ$ (c) Posisi <i>Saddle Point</i> pada energi dispersi pada TBG untuk sudut untiran $\theta = 3,48^\circ$	47
3.12	Beberapa bentuk grafik DOS monolayer graphene (a) $\Delta \vec{K}_x=0,05$, $\Delta \vec{K}_y=0,05, \Delta E(\vec{k})=0,1$ (b) $\Delta \vec{K}_x=0,01$, $\Delta \vec{K}_y=0,01, \Delta E(\vec{k})=0,01$ dan (c) $\Delta \vec{K}_x=0,01, \Delta \vec{K}_y=0,01, \Delta E(\vec{k})=0,01$ dan (d) Grafik DOS Monolayer dengan nilai galat 0,18	48
3.13	(a,b, dan c) Perbandingan grafik DOS untuk masing masing untiran yang diplot pada nilai energi dan DOS yang sama (bawah) Grafik DOS dari variasi ketiga sudut untiran θ $1,16^\circ$, $1,79^\circ$, dan $3,48^\circ$ yang diplot dalam satu grafik	49
3.14	Gambaran nilai kearpatan tiap layernya yang menyebabkan nilai kecepatan fermi semakin besar untuk nilai kerapatan yang semakin besar	51
1.1	Aproksimasi pola linear pada energi dispersi TBG untuk sudut untiran $1,16^\circ, 1,79^\circ$, dan $3,48^\circ$	58

DAFTAR SINGKATAN

TBG	<i>Twisted Bilayer Graphene</i>
SVH	<i>Singular Van Hove</i>
DOS	Rapat Keadaan/ <i>Density Of States</i>
ZB	Zona Brilloun(<i>Brilloun Zone</i>)
STM	<i>Scanning Tunnelling Microscopy</i>
STS	<i>Scanning Tunnelling Spectroscopy</i>
NR	<i>Newton Raphson</i>
FLG	<i>Few Layer Graphene</i>

DAFTAR LAMBANG

θ	Sudut Untiran Antar lembaran Graphene
$E(\vec{k})$	Energi Dispersi
s, p, p_x, p_y, p_z	Konfigurasi Elektron pada Atom
σ	Ikatan sigma (Sigma Bonds)
π, π^*	ikatan konduksi dan ikatan valensi (pi Bonds)
\hbar	$\frac{h}{2\pi}$, h tetapan Planck $h = 6.62 \times 10^{-34}$ Js, $\hbar = 1.054 \times 10^{-34}$
v_f	Kecepatan Fermi
$D(E)$	Rapat Keadaan
γ	Parameter energi lompatan antara atom A(B) pada lembaran pertama menuju atom A(B) yang terdekat pada lembaran kedua (Pada tumpukan AA)
γ_0	Parameter energi lompatan pada bidang yang sama (Pada tumpukan AB)
γ_1	Parameter energi lompatan antara atom A_1 dan atom A_2 (Pada tumpukan AB)
γ_2	Parameter energi lompatan antara atom $A_1(A_2)$ dan atom $B_1(B_2)$ (Pada tumpukan AB)
t_{\perp}	Coupling antara lembaran Graphene

$\vec{\delta}_1, \vec{\delta}_2$, dan $\vec{\delta}_3$	Vektor Posisi Atom Terdekat (<i>nearest – neighbor</i>)
$\vec{\delta}'_1, \vec{\delta}'_2$, dan $\vec{\delta}'_3$	Vektor posisi atom terdekat berikutnya (<i>second – nearest neighbor</i>)
$a_{\sigma i}(a_{\sigma i}^\dagger)$	Operator penghancur(Kreasi) Elektron
$a_{\sigma i}(a_{\sigma i}^\dagger)$	Indeks spin
t	Energi Lompatan ke atom terdekat
t'	Energi Lompatan ke atom terdekat berikutnya
m	Massa Elektron
H	Hamiltonan
ψ_k	Vektor Eigen
ϕ	Perubahan <i>Electrochemical Potential</i> antar dua lembaran graphene
L	Konstanta kisi pada TBG
S	Luasan dari sel satuan TBG
H_0^\perp	Model hamiltonan antar lembaran graphene (pada lembaran ganda graphene dengan untiran)
\vec{K}	Posisi titik braggg (titik Dirac) sebelum mengalami rotasi
\vec{K}^θ	Posisi titik braggg (titik Dirac) yang baru ketika telah mengalami rotasi
$\Delta\vec{K}$	Vektor Pergeseran titik Bragg (titik Dirac)(pada lembaran ganda graphene dengan untiran)
ΔE_{SVH}	Jarak antar SVH
t_\perp^θ	<i>Coupling</i> antar lembaran graphene