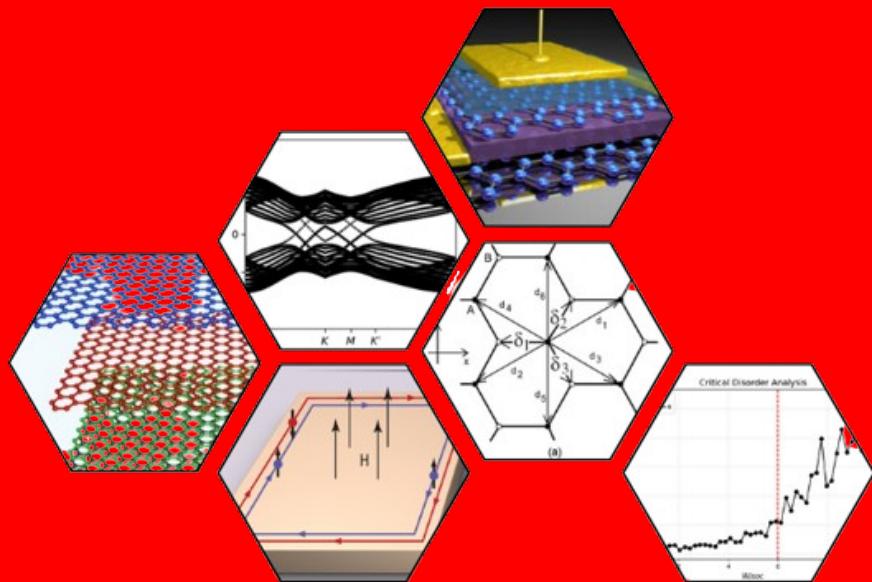


**STUDI PENGARUH STACKING LAYER DAN VARIASI PARAMETER PADA  
MODEL GRAFENA KANE-MELE**



**AKMAL SURATMI**

**H021211024**



**PROGRAM STUDI FISIKA**  
**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM**  
**UNIVERSITAS HASANUDDIN**

**2025**

**STUDI PENGARUH STACKING LAYER DAN VARIASI PARAMETER PADA  
MODEL GRAFENA KANE-MELE**

**AKMAL RAGA SURATMI**

**H021211024**



**PROGRAM STUDI FISIKA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS HASANUDDIN  
2025**

**STUDI PENGARUH STACKING LAYER DAN VARIASI PARAMETER PADA  
MODEL GRAFENA KANE-MELE**

AKMAL SURATMI

H021211024

Skripsi

sebagai salah satu syarat untuk mencapai gelar sarjana

Program Studi Fisika

pada

**PROGRAM STUDI FISIKA**

**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM**

**UNIVERSITAS HASANUDDIN**

**2025**

## **Abstract**

**AKMAL SURATMI.** Pengaruh Disorder Anderson Terhadap Struktur Spektrum Energi *Quantum Spin Hall* dalam Model Grafena Kane Mele 3D.(dibimbing oleh Tasrief surungan)

**LATAR BELAKANG.** Penelitian ini menganalisis perubahan spektrum energi **Quantum Spin Hall Insulators** (QSHI) pada model Kane-Mele grafena tiga dimensi (3D) yang disusun secara periodik sepanjang sumbu-*z* di bawah pengaruh lokalisasi Anderson. **TUJUAN.** Tujuan utama penelitian ini adalah meninjau pengaruh kekuatan disorder (*W*) pada sistem 3D serta mengamati degradasi *helical edge states* dalam struktur pita energi. **METODE.** Model 3D dikonstruksi dengan menumpuk lapisan-lapisan grafena dua dimensi (2D) menggunakan parameter hopping antarlapisan ( $t_{\perp} = 0,3t$ ) dan kopling spin-orbit intrinsik ( $\lambda_{SO} = 0,3\lambda_{SO}$ ). Simulasi dilakukan dengan metode *tight-binding*. Proses *averaging* dilakukan atas 500 realisasi disorder untuk meminimalisir fluktuasi statistik. **HASIL.** Hasil simulasi menunjukkan bahwa sistem mengalami perubahan struktur spektral pada  $W > 6,0\lambda_{SO}$ , ditandai dengan hilangnya persilangan pita tepi *helical* akibat lokalisasi Anderson. Kemudian Peta spektrum dibangun dengan memvariasi *W* dan  $t_{\perp}$ , mengungkapkan bahwa stabilitas QSHI tidak terpengaruhi seiring penambahan struktur antarlapisan. Analisis spektrum energi dan korelasi lokalisasi menunjukkan bahwa sistem mempertahankan keadaan tepi pada  $W < 6,0\lambda_{SO}$ , bahkan dengan peningkatan stabilitas hingga  $t_{\perp} = 0,5t$ . Temuan ini memberikan wawasan baru dalam desain material topologis berbasis struktur berlapis.

**Kata Kunci:** *Quantum Spin Hall Insulator*, grafena, model Kane-Mele, disorder Anderson, simulasi *tight-binding*

## Abstract

**AKMAL SURATMI. Spectral Response of Quantum Spin Hall Stability on 3D Kane-Mele Graphene Model to Anderson Disorder**(supervised by Tasrief Surungan)

**INTRODUCTION.** This study investigates the stability of the *Quantum Spin Hall Insulator (QSHI)* spectrum in a three-dimensional (3D) Kane-Mele graphene model with periodic stacking along the  $z$ -axis under Anderson localization.**AIM.** The primary objectives are to study disorder strength ( $W$ ) effect in the 3D system and observe the degradation of *helical edge states* in the energy band structure.**METHOD.** The 3D model is constructed by stacking two-dimensional (2D) graphene layers with interlayer hopping ( $t_{\perp} = 0.3t$ ) and intrinsic spin-orbit coupling ( $\lambda_{SO} = 0.3\lambda_{SO}$ ). Numerical simulations employ the *tight-binding method*. Disorder averaging is performed over 500 configurations to minimize statistical fluctuations. **RESULT**Simulation results reveal a spectral structure change at  $W > 6.0\lambda_{SO}$ , characterized by the disappearance of helical edge due to Anderson localization. A spectral map constructed by varying  $W$  and  $t_{\perp}$  demonstrates enhanced QSHI stability with increased interlayer coupling. Energy spectrum analysis and localization correlations confirm the persistence of edge states for  $W < 6.0\lambda_{SO}$ , with stability further improved up to  $t_{\perp} = 0.5t$ . These findings provide critical insights for designing topological materials with layered architectures.

**Keywords:** Quantum Spin Hall insulator, graphene, Kane-Mele model, Anderson disorder, tight-binding simulation

## DAFTAR ISI

<b>I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
I.1 Latar Belakang . . . . .	1
I.2 Landasan Teori . . . . .	2
I.2.1 Sifat Elektronik Material . . . . .	2
I.2.2 Efek Tepi dan Kuantisasi Konduktansi Tepi . . . . .	3
I.2.3 TKKN Invariant . . . . .	4
I.2.4 Model Haldane . . . . .	4
I.2.5 Model Kane dan Mele . . . . .	5
I.3 Tujuan Penelitian . . . . .	6
I.4 Manfaat Penelitian . . . . .	6
<b>II MODEL DAN METODE PENELITIAN</b>	<b>8</b>
II.1 Model Fisik Sistem . . . . .	8
II.1.1 Tight Binding Model Grafena . . . . .	8
II.1.2 Kane-Mele <i>Spin Orbit Coupling</i> . . . . .	8
II.1.3 <i>Stacking Layer</i> . . . . .	9
II.2 Formulasi dan Validasi Numerik . . . . .	10
II.2.1 Diskretisasi Ruang . . . . .	10
II.2.2 Representasi Bloch . . . . .	11
II.2.3 Validasi Efek Tepi . . . . .	12
II.3 Metode Analisis Spektrum . . . . .	13
II.3.1 Peta Spektrum Ribbon . . . . .	13
II.3.2 Peta Probabilitas Elektron . . . . .	13
II.3.3 Peta Kerapatan Energi . . . . .	14
II.4 Metode Analisis Topologi . . . . .	14
II.4.1 <i>Hybrid Wannier Function</i> . . . . .	14
II.4.2 <i>Axion Angle</i> . . . . .	17
II.5 Parameter dan Implementasi . . . . .	17

II.5.1 Tabel Parameter . . . . .	17
II.5.2 Ekstensi Numerik . . . . .	18
II.6 Diagram Alur Penelitian . . . . .	18
<b>III HASIL</b>	<b>22</b>
III.1 Batas kekuatan Disorder . . . . .	22
III.1.1 Validasi Topologis pada Sistem Bersih . . . . .	22
III.1.2 Transisi Topologis: Plot DoS pada Energi Nol . . . . .	23
III.2 Kerusakan Dispersi Energi dan Hilangnya Edge State Helical . . . . .	24
III.3 Peta Spektrum . . . . .	25
<b>IV KESIMPULAN</b>	<b>27</b>
IV.1 Kesimpulan . . . . .	27
IV.2 Saran . . . . .	27
<b>A Derivasi Matematis</b>	<b>32</b>
A.1 Tight Binding Model . . . . .	32
A.2 Operator Kreasi dan Anihilasi . . . . .	33
A.3 Derivasi Fase Berry, Koneksi Berry, dan Kelengkungan Berry . . . . .	35
A.4 Formulasi Wannier Center . . . . .	38
<b>B Lampiran Kode Program</b>	<b>41</b>
B.1 Kode Utama Simulasi(Model Kane-Mele 3D) . . . . .	41
B.2 Kode Validasi Model . . . . .	42
B.3 Kode Peta Variasi Parameter . . . . .	45
B.4 Kode Analisis Topologi . . . . .	48

## DAFTAR GAMBAR

II.1	Visualisasi skema stacking layer . . . . .	10
II.2	Diagram alur tahapan penelitian dari konstruksi model hingga analisis topologi. . . . .	20
II.3	Skema komputasi numerik menggunakan paket PythTB untuk ekstraksi properti topologi. . . . .	21
III.1	(a) Mode Trivial sistem( $SOC=0.06$ ) (b) Mode Non-Trivial sistem( $SOC=0.24$ ) . . . . .	22
III.2	Evolusi <i>Hybrid Wannier Function</i> . . . . .	23
III.3	Plot DoS pada $E = 0$ terhadap kekuatan disorder $W/\lambda_{SO}$ . . . . .	24
III.4	Struktur pita energi pada $W = 6.0\lambda_{SO}$ . Tidak tampak lagi lintasan edge state yang menyambung pita valensi dan pita konduksi. . . . .	25
III.5	Peta Spektrum sistem pada bidang parameter disorder. Daerah putih menandakan struktur spektrum topologis, sedangkan daerah gelap merupakan spektrum trivial. . . . .	26

## **DAFTAR TABEL**

II.1	Parameter Hamiltonian sistem <i>stacking layer</i> Honeycomb. . . . .	17
II.2	Konfigurasi geometri dan parameter kisi. . . . .	18
II.3	Parameter numerik dan konfigurasi simulasi PythTB. . . . .	18
II.4	Struktur kode numerik PythTB. . . . .	19

# BAB I

## PENDAHULUAN

### I.1 Latar Belakang

Material Kuantum datang sebagai pahlawan ketika komponen elektronik tradisional mencapai limit miniaturisasi. Di tengah maraknya riset tentang quantum transistors yang memanfaatkan fenomena superkonduktivitas, entanglement, dan fase topologis(Chang **and others** 2015), grafena mencuat sebagai primus inter pares: material dua dimensi yang tidak hanya menjanjikan transisi dari elektronik ke spintronik, tetapi juga membuka pintu bagi realisasi dissipationless electronics melalui proteksi topologi (Kane **and** Mele 2005b). Di sinilah fisika material bertemu dengan keanggunan matematika topologi, menciptakan simfoni sains yang berpotensi merevolusi komputasi kuantum hingga teknologi energi bersih(Nadeem **and others** 2021).

Grafena menunjukkan reputasi yang cemerlang sebagai laboratorium para peneliti sejak beberapa puluh tahun belakangan, hal ini disebabkan oleh sifat fisis grafena yang memukau. Dari segi ketahanan grafena bahkan mengalahkan berlian yang juga tersusun dari jenis atom yang sama. lebih dari itu, grafena juga menunjukkan konduktifitas yang tinggi yang ditunjukkan pada struktur pita energi grafena yang menunjukkan Dirac cone pada titik simetri BZ (Wallace 1947)(Painter **and** Ellis 1970). Reputasi konduktivitas grafena semakin melejit pada akhir abad ke 20 saat Haldane menunjukkan apa yang dia sebut parity anomaly, model yang dia tunjukkan adalah kisi honeycomb yang ada pada Graphite 2 dimensi(Grafena) dengan dua atom per sub-kisi yang diatur untuk sedemikian untuk mendukung terealisasinya proteksi topologi, hasilnya menunjukkan bahwa dispersi pita terjadi pada Dirac cone dan menciptakan fenomena konduktansi hall yang terkuantisasi (Haldane 1988). Fenomena ini menarik kita kembali pada Quantum Hall Conductance yang diteliti sebelum Haldane.

The Beauty of Physics adalah kalimat yang disandingkan dengan fenomena Quantum Hall Conductance oleh banyak ahli, hal ini didasarkan pada kuantisasi yang terjadi pada konduktansi ( $\sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{h}$ ) yang artinya pada regim kuantum detail material tidaklah menjadi penentu sifat elektronik melainkan hanya ditentukan oleh sifat topologis sistemnya(Klitzing, Dorda **and** Pepper 1980). Thouless pada penelitiannya kemudian menjelaskan fase Topologis, dimana sistem dibedakan dengan TKKN(Thouless-Kohmoto-Nightingale-den Nijs) sebuah integer yang diperoleh dengan mengintegralkan medan magnetik pada BZ, Hal ini didasarkan pada perhitungan genus yang membedakan sifat topologis sistem,

inilah kemudian melahirkan istilah Topological Insulators (Thouless **and** others 1982).

Topik ini terus berkembang hingga pada tahun 2005 Kane dan Mele membuka pintu baru pada penelitian ini, Kopling Spin-Orbit yang selama ini diabaikan pada grafena sebab kecilnya efeknya tidak memberikan kontribusi yang signifikan pada sifat fisis grafena. Namun, Kane dan Mele menunjukkan peningkatan nilai kopling spin-orbit yang terjadi pada energi menuju nol mutlak menciptakan dispersi pita pada sistem persis dengan yang terjadi pada model Haldane. Fase Topologis yang ditunjukkan pada model Kane dan Mele menunjukkan ketahanan yang luar biasa terhadap gangguan fisis, hal ini dikarenakan fenomena spin split yang menjaga Topological invariant dari system (Kane **and** Mele 2005b)(Kane **and** Mele 2005a)(Fu, Kane **and** Mele 2007).

Beberapa tahun setelah Kane dan Mele memperkenalkan  $Z_2$  invariant yang menunjukkan fenomena *Quantum Spin Hall* dalam material dua dimensi, mereka melanjutkan penelitian mereka dalam ekstensi tiga dimensi, dalam paper (Fu, Kane **and** Mele 2007). Namun ketertarikan kami pada penelitian ini terpusat pada ekstensi tiga dimensi yang dimodelkan pada penelitian (Lau, Ortix **and** Brink 2015) dengan menciptakan tumpukan lapisan grafena dua dimensi, hasilnya menunjukkan adanya efek topologis yang lemah, dengan kata lain tidak ada *surface state* seperti yang ditunjukkan pada penelitian (Fu, Kane **and** Mele 2007). Namun rangkaian penelitian yang dilakukan oleh (David Vanderbilt 2018) (Berry 1984) (Fukui **and** Hatsugai 2007) (Soluyanov **and** David Vanderbilt 2011) (Yu **and** others 2011) (Essin, Moore **and** David Vanderbilt 2009), membuat kami ingin mempelajari lebih jauh respon parameter-parameter yang berkaitan dengan fase topologi grafena ketika terjadi tumpukan lapisan dua dimensi. Penelitian ini juga terinspirasi dari modul yang dikembangkan oleh (Cole, Sinisa Coh **and** David Vanderbilt 2025) yang digunakan dalam studi fase topologis material.

## I.2 Landasan Teori

### I.2.1 Sifat Elektronik Material

Sifat elektronik material masih terhalang kabut yang tebal sebelum mekanika kuantum datang. Sebelumnya, sifat elektronik dari suatu material masih ditentukan oleh atom penyusun material tersebut. Paul Drude(1900) menjelaskan fenomena kelistrikan material dengan menganggap elektron sebagai gas gas ideal klasik, teori ini sayangnya gagal menjelaskan kapasitas panas elektronik (Kittel 1955).

Setelah datangnya mekanika kuantum kita tahu bahwa energi terkuantisasi pada level-level tertentu. Lebih dari itu, lewat representasi Bloch kita mampu

membangun struktur pita energi dalam sistem material, hal ini akhirnya memberikan kita informasi terbaru perihal sifat elektronik material.

Dalam menyelesaikan persamaan schrodinger, Bloch menggunakan fungsi gelombang periodik, dengan berlandaskan potensial periodik pada kristal.

$$\psi(r) = u_k(r)e^{ik \cdot r}$$

Interaksi antara gelombang elektron inilah yang akhirnya melahirkan celah pita energi. Klasifikasi material lahir dari informasi ini; isolator adalah material celah pita cukup besar antara pita valensi dan pita konduksi sehingga elektron tidak mampu berpindah bebas antara kisi, sedangkan konduktor adalah material dengan pita yang terisi setengah, sehingga elektron bebas bergerak di dalam material bahkan dengan energi tambahan yang kecil. Dari teori celah pita ini juga lahir semikonduktor, sebuah material dengan celah pita kecil sehingga elektron masih mampu melompat ke kisi tetangga.

### I.2.2 Efek Tepi dan Kuantisasi Konduktansi Tepi

Ide dari konduktansi tepi telah lahir jauh sebelum material topologis datang. Pada fisika klasik, ketika sebuah medan listrik  $E$  mengalir lurus kedalam sebuah pelat metal tipis sedemikian hingga elektron hanya mampu bergerak bebas dalam bidang dua dimensi. Kemudian sebuah medan magnet diaplikasikan tegak lurus terhadap pelat metal, gaya Lorentz akan memodulasi elektron menuju ketepian pelat(Kittel 1955).

$$\begin{aligned} E_y &= -\frac{eB\tau}{m}E_x \\ R_H &= \frac{E_y}{j_x B} \\ R_H &= -\frac{1}{ne}\rho_{xy} = R_H B_z \end{aligned}$$

Deskripsi matematis ini memberi kita informasi dari resisvititas yang ditentukan secara linear oleh penambahan kekuatan medan magnet  $B_z$ .

(Klitzing, Dorda **and** Pepper 1980) Kemudian mencoba membawa fenomena ini kedalam rezim kuantum. dan menunjukkan bahwa pada medan magnet kuat dan suhu rendah, koefisien Hall menjadi terkuantisasi. Kuantisasi dari gerakan orbital elektron dengan frekuensi siklotron  $\omega_c$  mengarah ke kuantisasi level Landau dengan energi  $\epsilon_m = \hbar\omega_c(m + 1/2)$ . Fenomena ini melahirkan kuantisasi konduktansi tepi;

$$\sigma_{xy} = Ne^2/h$$

### I.2.3 TKKN Invariant

Ketika visualisasi dilakukan terhadap pita energi pada sistem yang dikerjakan oleh (Klitzing, Dorda **and** Pepper 1980), akan diperoleh celah pita yang memperantara pita energi. Pertanyaan yang muncul setelah penelitian penting ini adalah; apa yang membedakan sistem ini dengan insulator biasa dan darimana nilai kuantisasi ini diperoleh.

Jawaban dari teka-teki ini muncul lewat diksi matematis yang menyelinap masuk ke skena fisika. Topologi, sebagaimana dijelaskan oleh (Thouless **and others** 1982), adalah diksi yang menjelaskan klasifikasi geometri yang tahan terhadap deformasi ringan, seperti benda dengan satu lubang akan tetap diklasifikasikan dengan "genus" satu, selama lubang tersebut tetap satu tidak peduli dengan bentuk kulitnya. Hal ini membantu kita menjelaskan bahwa selama dua pita memiliki properti topologi yang sama, keduanya mampu terkoneksi secara adiabatik tanpa penutupan celah.

Bilangan kuantum topologi yang mengikat pita-pita ini dapat dimengerti lewat formulasi Berry Phase(Berry 1984). Berry menunjukkan pada penelitiannya bahwa sebuah hamiltonian kuantum akan menghasilkan fase geometris kompleks ketika diberi variasi eksternal. Fase ini memiliki garis integral  $\mathcal{A}_m = i\langle u_m | \nabla_k | u_m \rangle$ , dan integral bidang  $\mathcal{F}_m = \nabla \times \mathcal{A}_m$ . Invariant atau bilangan kuantum dari sistem dapat dihitung dengan;

$$n_m = \frac{1}{2\pi} \int d^2k \mathcal{F}_m$$

### I.2.4 Model Haldane

Salah satu contoh material yang secara struktur mengizinkan fenomena topologis seperti yang dijelaskan pada bagian I.2.3 datang dari material dua dimensi Grafena (Castro Neto **and others** 2009)(Novoselov **and others** 2005). Material ini sangat menarik dari segi sifat elektronik dimana struktur pitanya menunjukkan apa yang disebut *Dirac Cone* pada sudut Brilioun Zone. Hal ini menyebabkan elektron bergerak mendekati kecepatan cahaya ketika melewati grafena. Fenomena ini juga makin jelas apabila melihat hamiltonian material ini, sebuah hamiltonian dengan susunan menyurupai hamiltonian relativistik Dirac tanpa massa;  $\mathcal{H}(q) = \hbar v_F q \cdot \vec{\sigma}$

Ide Kuantisasi tepi ini kemudian dibawa oleh (Haldane 1988) kedalam material grafena. Mengingat bahwa degenerasi di tengah titik *Dirac Cone* dilindungi oleh simetri pembalikan waktu dan simetri inversi, maka Haldane mencoba untuk merusak simetri inversi dengan mengaplikasikan beda potensial pada dua atom basis pada subkisi grafena(di masa itu masih disebut Graphite 2D, karena (Novoselov **and others** 2005) baru berhasil mengekstraksi Grafena beberapa

tahun kemudian) hal ini menciptakan hamiltonian dengan massa  $m$  yang berperan dalam penciptaan celah pada *Dirac Cone* sebesar  $2|m|$ .

Ketika prosedur perusakan simetri inversi di atas menghasilkan celah energi, yang mana mengantarkan material tersebut menjadi insulator. Namun ketika medan magnet dengan rerata nol diaplikasikan untuk menciptakan fase imajiner kepada sistem, Haldane menunjukkan bahwa sistem tersebut tidak lagi menjadi sebuah insulator biasa. Dengan menggunakan model material teoritis dengan struktur heksagonal, Haldane berhasil menciptakan Kuantisasi tepi  $\sigma_{xy} = e^2/h$ .

Hasil yang diperoleh oleh Haldane dapat dikaitkan dengan perolehan bilangan kuantum yang didiskusikan pada I.2.3. Seperti yang ditunjukkan oleh (Berry 1984), Fase periodik menyebabkan terpelintirnya fungsi Bloch dalam ruang reciprocal. Pelintiran fungsi oleh Fase Berry inilah yang bertanggung jawab sebagai medan magnet imajintif pada ruang momentum, memodulasi elektron menuju ketepian kristal.

### I.2.5 Model Kane dan Mele

Didasari oleh keberhasilan ekstraksi material dua dimensi grafena oleh (Novoselov **and others** 2005) dan eksotisme model (Haldane 1988), Kane dan Mele dalam dua papernya (Kane **and** Mele 2005b)(Kane **and** Mele 2005a) memperkenalkan apa yang disebut  $Z_2$  invariant yang merupakan klasifikasi baru untuk material topologis yang begitu kuat berkat perlindungan simetri pembalikan waktu.

Pada penellitian pertamanya (Kane **and** Mele 2005b), mereka menunjukkan bagaimana aplikasi dari dua model (Haldane 1988) dan doping kopling orbit spin pada grafena menciptakan modulasi yang unik, dimana pemisahan spin ini memaksa adanya transfer spin up dan down ketepian material, namun modulasi arah yang berbanding terbalik antar dua spin membuat total *chern number* menjadi nol. Kane mele juga menunjukkan adanya peralihan pita valensi menuju konduksi dan sebaliknya(yang merupakan konsekuensi *Krammer's pair*) pada struktur pita ribbon sistem. Untuk memperolehnya, Kane dan Mele merumuskan model hamiltonian Tight-Binding

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{KM,l} = & t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{il\sigma}^\dagger c_{jl\sigma} + i\lambda_{SO} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} \nu_{ij} c_{il\sigma}^\dagger s_{\sigma\sigma'}^z c_{jl\sigma'} \\ & + i\lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger (\mathbf{s} \times \hat{\mathbf{d}}_{ij})_{\sigma\sigma'}^z c_{j\sigma'} + \lambda_v \sum_{i,\sigma} \xi_i c_{il\sigma}^\dagger c_{il\sigma}.\end{aligned}$$

Di akhir mereka juga menunjukkan bagaimana perilaku spintronik ini dapat mengevolusi perangkat elektronik modern seperti pengembangan transistor

spintronik yang *dissipationless*.

Pada penelitian keduanya (Kane **and** Mele 2005a), Kane dan Mele secara resmi memperkenalkan klasifikasi topologis yang mereka temukan pada penelitian sebelumnya. Dengan menggunakan argumen Laughlin, Kane dan Mele menjelaskan bagaimana invariant pembalikan waktu dipengaruhi hanya oleh genap dan ganjil flux yang diberikan pada sistem silinder. Dari argumen inilah Kane dan Mele meyakinkan perihal klasifikasi  $Z_2$  yang hanya bernilai 0 dan 1. Untuk menghitung properti tersebut, Kane dan Mele menggunakan Pfaffian untuk melihat pelintiran fungsi gelombang pada ruang momentum. Namun pada penelitian lebih lanjut (David Vanderbilt 2018) (Fukui **and** Hatsugai 2007) (Soluyanov **and** David Vanderbilt 2011), nilai invariant  $Z_2$  kerap diselidiki menggunakan parameter yang lebih mudah dan presisi secara numerik.

### I.3 Tujuan Penelitian

1. Memperoleh struktur pita ribbon pada model *stacking* grafena dengan *hopping* antar lapisan yang menunjukkan perilaku efek tepi sistem.
2. Memperoleh peta respon sistem *stacking* grafena terhadap perubahan parameter *hopping* dan potensial kisi lewat analisis struktur pita, kerapatan energi, dan probabilitas elektron.
3. Memperoleh plot evolusi *Hybrid Wannier Function Center* terhadap pergerakan ruang momentum searah dengan arah penumpukan lapisan.
4. Memvalidasi keberadaan atau ketiadaan *Surface State* pada permukaan grafena *Stacking* dengan analisis perilaku magnetoelektrik atau *Axion Angle*.

### I.4 Manfaat Penelitian

1. **Pengembangan Teori Transisi Dimensi:** Memberikan wawasan teoretis mengenai bagaimana sifat topologi dua dimensi (model Kane-Mele) berevolusi dan berinteraksi saat disusun menjadi sistem tiga dimensi (*stacking*) melalui parameter *hopping* antar-lapisan.
2. **Panduan Desain Material Spintronik:** Menyediakan data dasar bagi perancangan material masa depan melalui pemetaan respon spektral, sehingga memungkinkan identifikasi kondisi ideal untuk mempertahankan *surface states* yang stabil.

3. **Karakterisasi Invarian Topologi:** Memperjelas hubungan antara parameter fisis deterministik (seperti potensial kisi dan *hopping*) dengan nilai *Axion Angle* () sebagai indikator utama respon magnetoelektrik sistem.
4. **Penyediaan Peta Parameter Fisis:** Menghasilkan profil respon sistem yang dapat digunakan sebagai acuan dalam melakukan penalaan parameter (*parameter tuning*) pada studi eksperimental material isolator topologis.

## BAB II

### MODEL DAN METODE PENELITIAN

#### II.1 Model Fisik Sistem

##### II.1.1 Tight Binding Model Grafena

Penelitian ini menggunakan pendekatan Tight Binding Model untuk merepresentasikan hamiltonian penuh dari material. Model ini dipilih, selain karena digunakan dalam rujukan inti PhysRevB.91.085106 dan (Kane **and** Mele 2005b), namun juga karena sifat elektronik grafena yang hanya dipengaruhi oleh orbital  $P_z$ , sehingga material tersebut sangat efektif dibawah kedalam bentuk Tight Binding untuk mempermudah penyelesaian persamaan schrodinger.

Model Tight Binding merepresentasikan atom dalam kisi dengan satu basis orbital  $|f_n\rangle = |\phi(x - a)\rangle$  yang terlokalisasi, dengan satu basis orbital setiap atom, orbital ini akan saling tumpang tindih dengan basis atom terdekat. Sehingga Hamiltonian sistem dapat dibangun dengan dua suku; suku lokal ditambah suku tumpang tindih (Grosso **and** Parravicini 2014):

$$H = \sum_n \epsilon_n |f_n\rangle\langle f_n| + \sum_n b_{n+1} |f_n\rangle\langle f_{n+1}| + \text{H.c.}$$

Untuk Grafena, yang mana merupakan material dua dimensi dengan struktur *Honey comb*, orbital terluar atom akan tumpang tindih dengan tiga tetangga terdekat ditambah enam tetangga terdekat kedua.

Dalam literatur modern (Castro Neto **and others** 2009), model hamiltonian Tight-Binding sering dituliskan dalam bentuk kuantisasi kedua. Dimana dalam penggambaran mekanika kuantum, sistem ditentukan oleh fungsi gelombang, sedangkan dalam kuantisasi kedua, elektron dianihilasi dan diciptakan dalam medan fermion oleh operator  $c$  dan  $c^\dagger$ . Sehingga secara matematis, Hamiltonian Grafena dapat diaproksimasi dengan bentuk;

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (a_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma,j} + \text{H.c.}) - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} (a_{\sigma,i}^\dagger a_{\sigma,j} + b_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma,j} + \text{H.c.}),$$

##### II.1.2 Kane-Mele Spin Orbit Coupling

Untuk memperoleh fase topologis, Kane-Mele(Kane **and** Mele 2005b) memanfaatkan pengaruh *Spin Orbit Coupling* pada grafena yang selama ini diabaikan sebab memiliki pengaruh yang sangat kecil pada sifat fisis grafena.

Kane-Mele menggunakan dua replika model HaldanePhysRevLett.61.2015 yang menambahkan fase imajiner pada suku hopping tetangga kedua yang menciptakan medan magnet imajinatif pada ruang momentum, memodulasi gerakan elektron ketepi material. Kane-Mele meningkatkan model ini dengan menambahkan variabel *SOC* dalam suku tersebut, menyebabkan modulasi berbeda setiap spin. secara matematis;

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{KM},l} = & t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{il\sigma}^\dagger c_{jl\sigma} + i\lambda_{\text{SO}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} \nu_{ij} c_{il\sigma}^\dagger s_{\sigma\sigma'}^z c_{jl\sigma'} \\ & + i\lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma\sigma'} c_{il\sigma}^\dagger (\mathbf{s} \times \hat{\mathbf{d}}_{ij})_{\sigma\sigma'}^z c_{jl\sigma'} + \lambda_v \sum_{i,\sigma} \xi_i c_{il\sigma}^\dagger c_{il\sigma}. \end{aligned}$$

Penambahan variabel spin di suku imajiner pada akhirnya akan mempertahankan simetri pembalikan waktu yang dirusak dalam model Haldane.

$$\begin{aligned} \mathcal{T} \mathcal{H}_{\text{KM},l} \mathcal{T}^{-1} = & \mathcal{T} \left[ t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{il\sigma}^\dagger c_{jl\sigma} + i\lambda_{\text{SO}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \nu_{ij} c_{il\sigma}^\dagger s_{\sigma\sigma'}^z c_{jl\sigma'} \right. \\ & \left. + i\lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle} c_{il\sigma}^\dagger (\mathbf{s} \times \hat{\mathbf{d}}_{ij})_{\sigma\sigma'}^z c_{jl\sigma'} + \lambda_v \sum_{i,\sigma} \xi_i c_{il\sigma}^\dagger c_{il\sigma} \right] \mathcal{T}^{-1} \\ = & t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{il\bar{\sigma}}^\dagger c_{jl\bar{\sigma}} - i\lambda_{\text{SO}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \nu_{ij} c_{il\bar{\sigma}}^\dagger s_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}'}^z c_{jl\bar{\sigma}'} \\ & - i\lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle} c_{il\bar{\sigma}}^\dagger (\mathbf{s} \times \hat{\mathbf{d}}_{ij})_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}'}^z c_{jl\bar{\sigma}'} + \lambda_v \sum_{i,\sigma} \xi_i c_{il\bar{\sigma}}^\dagger c_{il\bar{\sigma}} \\ = & \mathcal{H}_{\text{KM},l}. \end{aligned}$$

### II.1.3 Stacking Layer

Kami membangun model tiga dimensi dengan menumpuk lapisan model Kane-Mele (Kane **and** Mele 2005b), mengikuti pendekatan penelitian berikut PhysRevB.91.085106. Hamiltonian total terdiri dari suku Kane-Mele intralayer, hopping antarlapisan, dan kopling spin-orbit (SOC) antarlapisan:

$$\mathcal{H} = \underbrace{\sum_l \mathcal{H}_{\text{KM},l}}_{\text{Intralayer}} + \underbrace{\tau \sum_{\langle l,l' \rangle} \sum_{i,\sigma} c_{il\sigma}^\dagger c_{il'\sigma} + i\lambda_{SO\perp} \sum_{\langle l,l' \rangle} \sum_{i,\sigma,\sigma'} \mu_{ll'} c_{il\sigma}^\dagger s_{\sigma\sigma'}^z c_{il'\sigma'},}_{\text{Hopping Antarlapisan}} \underbrace{\quad}_{\text{Kopling Spin-Orbit Antarlapisan}}$$

Seperti yang ditunjukkan pada gambar II.1, *stacking* dilakukan dengan

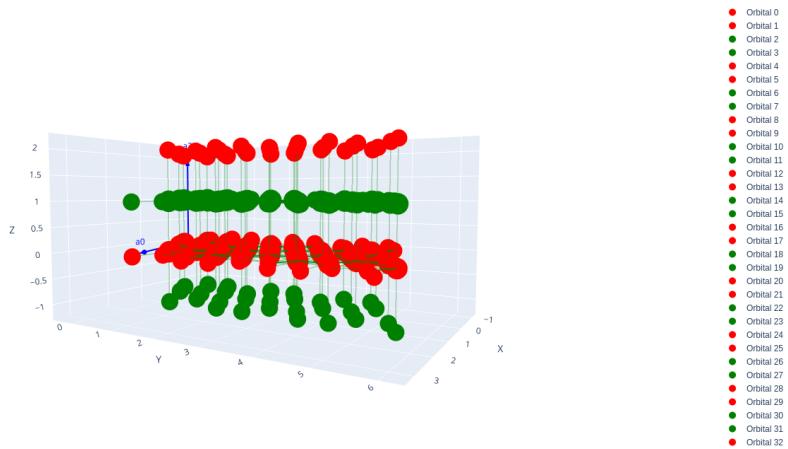


Figure II.1: Visualisasi skema stacking layer

menumpuk grafena dua dimensi di sumbu x, dengan perbedaan warna merah dan hijau menunjukkan perbedaan layer. Skema ini menciptakan bentuk geometris tiga dimensi kepada grafena.

## II.2 Formulasi dan Validasi Numerik

### II.2.1 Diskretisasi Ruang

Dalam mekanika kuantum partikel diperlakukan sebagai variabel kontinyu, yang diatur oleh fungsi gelombang  $\psi(x)$ . Namun dalam kasus seperti material grafena, dimana basis orbital setiap atom terlokalisasi, ruang posisi dapat kita diskretisasi. Sehingga hamiltonian dari sistem juga dapat kita modelkan dalam bentuk matrix tridiagonal (Grosso **and** Parravicini 2014).

$$H = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & \mathbf{V} & 0 & \cdots & 0 \\ \mathbf{V}^\dagger & \mathbf{H}_1 & \mathbf{V} & \cdots & 0 \\ 0 & \mathbf{V}^\dagger & \mathbf{H}_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \mathbf{V} \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{V}^\dagger & \mathbf{H}_N \end{pmatrix}.$$

Dengan model hamiltonian ini kita akan dengan mudah memperoleh nilai energi dan fungsi gelombang dari sistem, dengan memasukkan model ini kedalam komputer dan mendiagonalisasi hamiltonian dengan  $H_n\psi_n(r) = E_n\psi(r)$ .

## II.2.2 Representasi Bloch

Mengikuti formulasi yang dijabarkan oleh (**Yusufaly2013**) (Cole, Sinisa Coh **and** David Vanderbilt 2025),

Vektor dalam kisi didefinisikan sebagai

$$R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$$

dengan melakukan transformasi kedalam ruang reciprocal, kita peroleh vektor

$$\begin{aligned} G &= m_1 b_1 + m_2 b_2 + m_3 b_3 \\ a_i \cdot b_j &= 2\pi\delta_{ij} \\ e^{iG \cdot R} &= 1 \end{aligned}$$

Misalkan  $\mu$  adalah label, sehingga  $t_\mu$  adalah lokasi dari atom pada unit kisi. Untuk basis sistem Tight-Binding, seperti yang disinggung pada II.1.1, dapat dituliskan sebagai  $\zeta_{\mu\alpha}(r - R - t_\mu)$ . Dengan memperkanalkan index  $j = \mu\alpha$

$$\phi_{R_j}(r) = \phi_j(r - R) = \zeta_{\mu\alpha}(r - R - t_\mu)$$

$$\langle \phi_{R_j} | \phi_{R_j} \rangle = \delta_{RR'} \delta_{ij}$$

dan hamiltonian

$$H_{ij}(R) = \langle \phi_{R'_i} | H | \phi_{R'+R_j} \rangle = \langle \phi_{0_i} | H | \phi_{R_j} \rangle$$

Untuk konvensi Bloch, paket PythTb (Cole, Sinisa Coh **and** David Vanderbilt 2025) (S. Coh **and** D. Vanderbilt 2022) menggunakan dua konvensi Bloch. Namun dalam kasus topologi yang memerlukan informasi probabilitas elektron pada setiap unit cell, kita akan terfokus pada konvensi dengan penambahan fase extra.

Dengan mengkonstruksi fungsi *Bloch-like*

$$\begin{aligned} \mathcal{X}_j^k(r) &= \sum_R e^{ik \cdot (R + t_j)} \phi_j(r - R) \\ |\mathcal{X}_j^k\rangle &= \sum_R e^{ik \cdot (R + t_j)} |\phi_{R_j}\rangle \\ \langle \mathcal{X} | \mathcal{X}' \rangle &= \int_{cell} d^3 r \mathcal{X}'(r) \\ \langle \mathcal{X}_j^k | \mathcal{X}_j^k \rangle &= \delta_{ij} \end{aligned}$$

yang kemudian di ekspansikan sepanjang nilai  $j$  untuk memperoleh fungsi Bloch

$$|\psi_{nk}\rangle = \sum_j C_j^{nk} |\mathcal{X}_j^k\rangle$$

Matriks Hamiltonian kemudian dapat diperoleh sebagai

$$H_{ij}^k = \langle \mathcal{X} | H | \mathcal{X}' \rangle = \sum_R e^{ik \cdot (R + t_j - t_i)} H_{ij}(R)$$

dimana solusi dari persamaan secular dapat diselesaikan secara langsung lewat Diagonalisasi untuk memperoleh nilai dan fungsi eigen

$$\mathcal{H}_k \cdot \mathcal{C}_{nk} = E_{nk} \mathcal{C}_{nk}$$

Karena penelitian ini mengkaji model dengan pertimbangan parameter spin, paket yang dikembangkan oleh (Cole, Sinisa Coh **and** David Vanderbilt 2025) juga menyediakan solusi diagonalisasi dengan formulasi matematis

$$n_{i,ss'} = \frac{1}{N} \sum_{nk}^{occ} (\mathcal{C}_{is}^{nk})^* \mathcal{C}_{is'}^{nk}$$

$$H_{ij,ss'} = \sum_a h_{ij,a} \sigma_{a,ss'}$$

### II.2.3 Validasi Efek Tepi

Setelah memperoleh spektrum energi dari diagonalisasi hamiltonian pada ruang diskrit, kita akan memperoleh spektrum energi dari sistem yang periodik, dimana elektron memiliki potensi untuk menjelajah seluruh titik kisi dengan probabilitas universal. Namun dalam kasus konduktansi tepi, elektron tidak menjelajah seluruh titik kisi, melainkan termodulasi ketepian. Maka untuk memvalidasi model dan prosedur numerik, kita perlu menghitung spektrum energi sistem yang terbatas(tidak periodik). Hal ini dilakukan dengan *slab geometry*, dimana ruang tiga dimensi direduksi menjadi dimensi yang lebih rendah (Cole, Sinisa Coh **and** David Vanderbilt 2025).

Untuk keperluan validasi, penelitian ini menggunakan arah (100), dimana arah y dan z tetap periodik sedangkan arah x terbatas. Secara konsep, seharusnya struktur pita akan menunjukkan terciptanya celah pita pada energi fermi akibat terlokalisasinya elektron di *bulk*, namun akan ada dua pita yang berbelok dari valensi ke pita konduktif, *vice versa* (Lau, Ortix **and** Brink 2015) .

Pada penelitian ini, efek dari *Periodic Boundary Condition* dan *Open Boundary Condition* juga diuji, untuk melihat bagaimana distribusi energi yang

diperbolehkan pada sistem ketika diterapkan batas pada material dan bagaimana respon sistem ketika diberi kondisi periodik (Cole, Sinisa Coh **and** David Vanderbilt 2025) .

### II.3 Metode Analisis Spektrum

Untuk melihat bagaimana respon sistem terhadap perubahan parameter, kita akan membangun peta respon energi. Hal ini dilakukan dengan membandingkan hasil plot fungsi energi terhadap variasi parameter. Pada penelitian ini, parameter yang akan divariasikan adalah stragged potential pada atom lokal dan kopling rashba, yang mana dijelaskan pada (Kane **and** Mele 2005b), melawan efek *Spin Orbit Coupling*. Plot-plot energi akan disusun dalam sumbu stragged potential vs kopling rashba, untuk melihat di titik mana *Spin Orbit Coupling* kalah.

$$\lambda_R < \lambda_{SOC}$$

#### II.3.1 Peta Spektrum Ribbon

Peta pertama yang akan dibangun adalah spektrum ribbon. Seperti yang disinggung sebelumnya; *edge state* hanya akan tervisualisasi pada spektrum pita energi apabila diterapkan *slab geometry*. Untuk satu nilai parameter, plot akan dibangun dengan mendiagonalisasikan energi pada dua sumbu periodik dan satu sumbu terbatas di titik-titik simetri tinggi; ( $\bar{\Gamma}, \bar{X}, \bar{M}, \bar{\Gamma}, \bar{Y}$ )

Untuk menentukan kriteria dari *edge state*, kita hanya perlu memperhatikan transisi pita konduksi menuju pita valensi, dan sebaliknya. di titik stragged potential dan rashba besar seharusnya struktur pita akan menuju ke bentuk insulator trivial.

#### II.3.2 Peta Probabilitas Elektron

Hasil dari diagonalisasi matrix hamiltonian tidak hanya memberikan kita informasi eigen energi, tapi memberikan kita informasi dari eigen vektor(eigen state)  $\psi_n(k)$ . Eigen state( $\psi_n(k)$ ) ini dapat dituliskan sebagai superposisi orbital-orbital basis;

$$|\psi_n\rangle = \sum_{\alpha} c_{n\alpha} |\phi_{\alpha}\rangle$$

Nilai kuadrat dari  $\sum_{\alpha} c_{n\alpha}$  secara fisis menunjukkan probabilitas keberadaan elektron, nilainya akan berkisar dari 0-1. Penelitian ini memanfaatkan nilai probabilitas ini untuk mendeteksi distribusi probabilitas pada sistem. Pita energi

akan kembali diekstraksi dalam prosedur ini, namun dengan mode periodik dan penambahan pengukur probabilitas untuk melihat aktivitas elektron pada sistem.

Untuk menentukan kriteria dari *edge state* kita hanya perlu melihat pencampuran probabilitas pada struktur pita. Pada insulator trivial, probabilitas elektron akan kontras antara valensi dan konduksi, berbeda dengan mode tepi yang akan mencampur probabilitas (Cole **and** David Vanderbilt 2025)

### II.3.3 Peta Kerapatan Energi

Pita energi hanya memberikan kita gambaran visual dari perilaku sistem, maka untuk memvalidasi keberadaan keadaan tepi(*edge state*) kita perlu memperoleh nilai kuantitatif dari energi pada celah pita. Penelitian ini memanfaatkan ekstraksi kerapatan keadaan untuk mendeteksi keberadaan *edge state* pada energi fermi. Lebih dari itu, tidak seperti pita energi yang memaksa kita mereduksi dimensi untuk keperluan visualisasi, kerapatan keadaan mengizinkan kita untuk memotong seluruh sumbu(111).

Rapat keadaan dalam mekanika kuantum dimodelkan sebagai (Grosso **and** Parravicini 2014) ;

$$D(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$$

Karena komputer tidak bisa membaca fungsi delta, maka penilitian ini menggunakan metode histogram untuk mendekati nilai analitik. Rentang energi akan dibagi menjadi bin dengan lebar  $\Delta E$ , hasil diagonalisasi hamiltonian kemudian akan menentukan berapa banyak level energi  $E_n$  yang masuk kedalam setiap bin, yang kemudian akan dibagi dengan  $\Delta E$  untuk memperoleh kerapatan energi.

## II.4 Metode Analisis Topologi

### II.4.1 *Hybrid Wannier Function*

Penggunaan Hybrid Wannier Centers (HWC) dalam model stacking layer ini bertujuan untuk memetakan perubahan sifat topologi sistem saat dimensi material diperluas. Dengan mengamati pola winding pada spektrum Wilson Loop, perubahan fase topologis yang dipicu oleh interaksi antar-lapisan dapat diidentifikasi secara visual melalui transisi antara pola partner-switching (topologis) dan pola berpasangan (trivial), mengikuti prosedur (Cole, Sinisa Coh **and** David Vanderbilt 2025).

Kane dan Mele (Kane **and** Mele 2005a) menjelaskan bahwasanya invariant

yang menjelaskan sifat topologi dari sistem *Quantum Spin Hall* dapat ditentukan dari ganjil genap dari fluks, sehingga terdapat dua mode dari sistem ini; fase odd(Topologi,  $Z_2 = 1$ ) dan fase even(Trivial Insulator,  $Z_2 = 0$ ). Untuk memperoleh nilai dari  $Z_2$ , membagi ruang momentum menjadi dua sub-ruang; ruang titik TRIM(*Time Reversal Symmetry*) dan sub-ruang dimana tumpang tindih antar matrix bersifat anti-unitarian( $\Theta$ ). Untuk matrix anti-simetrik  $2 \times 2$ , seluruh informasi dapat diperoleh dari Pfaffian;

$$P(\mathbf{k}) = Pf[\langle u_i(\mathbf{k}) | \bar{\theta} | u_j(\mathbf{k}) \rangle])$$

Lewat perolehan ini,  $Z_2$  invariant akhirnya dapat diperoleh dengan melihat perpindahan Pfaffian pada titik TRIM menghasilkan nol yang genap, maka sistem disebut even mode, begitupun sebaliknya.

$$\Delta = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\partial\tau} d\mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \log[P(+i\delta)] \quad \text{mod } 2,$$

Meskipun formulasi Pfaffian memberikan definisi matematis yang kokoh, implementasi numeriknya sering kali terkendala oleh ambiguitas fase fungsi Bloch. (Soluyanov **and** David Vanderbilt 2011) menawarkan pendekatan alternatif melalui representasi Wannier. Dalam metode ini, invarian  $Z_2$  ditentukan melalui evolusi *Wannier Charge Centers* (WCC) dalam skema *hybrid*. Evolusi posisi pusat muatan ini terhadap momentum  $\mathbf{k}$  pada arah tegak lurusnya menunjukkan 'pelintiran' topologis; di mana pada fase topologis ( $Z_2=1$ ), jalur-jalur WCC akan bertukar pasangan Kramers dan menghasilkan jumlah persilangan yang ganjil pada garis referensi di Zona Brillouin.

Dalam ruang satu dimensi, WCC dapat didefinisikan sebagai suku integrasi dari Potensial Berry(Berry 1984)(Gresch **and others** 2017);

$$\bar{x}_n = \frac{ia_x}{2\pi} \text{int}_{-\pi/a_x}^{\pi/a_x} dk_x \mathcal{A}_n(k_x)$$

Atau;

$$\bar{x}_n(k_y, k_z) = \frac{a_x}{2\pi} \int_{-\pi/a_x}^{\pi/a_x} dk_x \mathcal{A}_n(k_x, k_y, k_z)$$

Dimana  $\mathcal{A}_n(k)$  dituliskan sebagai;

$$\bar{A}_n(\bar{k}) = \langle n_k | \nabla_{\bar{R}} | n_k \rangle$$

Untuk membawa persamaan ini ke dalam perhitungan numerik, kita tidak dapat langsung mengevaluasi turunan  $\nabla_{\vec{R}}$ , sehingga koneksi Berry didefinisikan melalui transport paralel diskret antar titik  $\mathbf{k}$  pada kisi Brillouin (Fukui, Hatsugai **and** Suzuki 2005). Didefinisikan *link variable*

$$U_n(k_l) = \frac{\langle n(k_l) | n(k_l + \hat{\mu}) \rangle}{|\langle n(k_l) | n(k_l + \hat{\mu}) \rangle|}$$

yang merepresentasikan holonomi fase Berry sepanjang satu langkah mesh. Hubungan antara  $U_n$  dan koneksi Berry kontinu diberikan oleh

$$\langle n(k) | n(k + \delta k_\mu) \rangle \simeq \exp[-i A_\mu(k) \delta k_\mu],$$

sehingga dengan mengikuti prosedur (Cole, Sinisa Coh **and** David Vanderbilt 2025) koneksi Berry diskret dapat diekstraksi sebagai

$$A_\mu(k) = -\frac{1}{i \delta k_\mu} \log U_n(k).$$

Dalam implementasi numerik yang digunakan oleh paket (Cole, Sinisa Coh **and** David Vanderbilt 2025), ekstraksi nilai  $A_\mu(k)$  melalui prosedur diskretisasi ini disusun menjadi sebuah operator transport paralel non-Abelian yang dikenal sebagai operator Wilson Loop,  $D_\perp(k)$ . Berdasarkan formulasi (Yu **and others** 2011), operator ini didefinisikan sebagai produk dari *link variables* di sepanjang jalur tertutup dalam zona Brillouin:  $D(\mathbf{k}_\perp) = U(k_1)U(k_2)\dots U(k_N)$

Matriks Wilson Loop ini memiliki nilai eigen berbentuk  $\lambda_m = e^{i\theta_m(k_\perp)}$ , di mana fase  $\theta_m$  merupakan fase Berry terakumulasi yang secara fisik merepresentasikan posisi pusat muatan Wannier hibrida (*Hybrid Wannier Centers*) dalam satuan tanpa dimensi:

$$\bar{x}_m(k_\perp) = \frac{\theta_m(k_\perp)}{2\pi} a_x$$

Dengan demikian, prosedur Soluyanov-Vanderbilt untuk menentukan invarian  $Z_2$  dilakukan dengan memplot evolusi fase  $\theta_m$  terhadap momentum tegak lurusnya ( $k_\perp$ ). Dalam fase topologis ( $Z_2 = 1$ ), spektrum fase ini akan menunjukkan fenomena *partner switching*, di mana jalur-jalur pusat muatan Wannier saling bertukar pasangan Kramers. Secara praktis, algoritma ini memastikan bahwa perhitungan tetap *gauge-invariant*, sehingga sifat topologi material dapat diidentifikasi secara stabil tanpa memerlukan syarat *gauge-fixing* yang rumit.

### II.4.2 Axion Angle

Gerakan orbital elektron dalam kristal tiga dimensi menciptakan *Pseudoscalar magnetoelectric phase coupling*  $\theta$  (Essin, Moore **and** David Vanderbilt 2009). Perhitungan  $\theta$  adalah cara sederhana untuk meninjau adanya *surface hall conductivity* pada material (Wilczek 1987).

$$\delta\mathcal{L}_{EM} = \frac{\theta e^2}{2\pi h} \mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$$

Dengan itu (Qi, Hughes **and** Zhang 2008) medefinisikan  $\theta$  sebagai integrasi elektron dalam dimensi yang satu kali lebih tinggi, dengan koneksi Berry  $A_j^{\mu\nu} = i\langle u_\mu | \partial_j | u_\nu \rangle$ , diperoleh

$$\theta = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} d^3k \epsilon_{ijk} \text{Tr}[A_i \partial_j A_k - i \frac{2}{3} A_i A_j A_k]$$

(Qi, Hughes **and** Zhang 2008) menunjukkan bahwa sistem topologis yang invarian terhadap pembalikan waktu berada pada dimensi 4 + 1 yang diklasifikasikan dengan *second chern number*. Dengan itu  $\theta(\beta)$  dihitung untuk ekspresi *second chern number* menggunakan *Four Curvature Formulation*

$$\theta = \frac{1}{16\pi} \int_0^\beta d\beta' \int d^3k \epsilon_{ijkl} \text{Tr}[\mathcal{F}_{ij}(\mathbf{k}, \beta') \mathcal{F}_{kl}(\mathbf{k}, \beta')]$$

## II.5 Parameter dan Implementasi

### II.5.1 Tabel Parameter

Table II.1: Parameter Hamiltonian sistem *stacking layer Honeycomb*.

Parameter	Simbol	Nilai	Satuan/Keterangan
Hopping dasar	$t$	1.0	Unit energi ( $e.V$ )
Spin-Orbit Coupling	$\lambda_{SOC}$	0.25 – 0.30	Nilai paper Kane-Mele
Rashba Coupling	$\lambda_R$	0.0 – 0.30	Pecahnya simetri inversi
Staggered Potential	$\Delta$	0.0 – 3.0	Perbedaan energi subkisi
Amplitudo Modulasi	$m_{axion}$	0.5	Onsite potensial terhadap $\beta$

Table II.2: Konfigurasi geometri dan parameter kisi.

Parameter	Deskripsi/Nilai
Struktur Kristal	Hexagonal ( <i>Honeycomb-like</i> )
Vektor Kisi Dasar	$\vec{a}_1 = (1, 0, 0)$ , $\vec{a}_2 = (0.5, \sqrt{3}/2, 0)$ , $\vec{a}_3 = (0, 0, 1)$
Posisi Orbital	$A = (1/3, 1/3, 0)$ , $B = (2/3, 2/3, 0)$
Derajat Kebebasan	<i>Spinful</i> (Matriks Pauli $\sigma_{x,y,z}$ )
Arah Periodik	[0, 1, 2] (3D Bulk)
Dimensi Geometri Slab	20 unit sel (Arah-y terbatas)

Table II.3: Parameter numerik dan konfigurasi simulasi PythTB.

Parameter	Variabel Kode	Nilai/Pengaturan
Grid Momentum (HWC)	mesh_shape	$41 \times 41 \times 41$
Grid Momentum (Axion)	nks	$30 \times 30 \times 30$
Rentang Parameter $\beta$	betas	$[0, 2\pi]$
Jumlah Sampling $\beta$	n_beta	21 titik
Skema Diferensiasi	diff_scheme	<i>Central</i>
Orde Diferensiasi	diff_order	8
Arah Integrasi WCC	axis_idx	1 (Sumbu-y)

## II.5.2 Ekstensi Numerik

Dalam mengimplementasikan model yang telah dibangun pada II.1.3, penelitian ini memanfaatkan paket PythTB 2.0 Python yang dikembangkan oleh grub peneliti (Cole, Sinisa Coh **and** David Vanderbilt 2025). Paket ini dibangun untuk mengonstruksi dan menganalisis model Tight-Binding, yang di khususkan untuk studi teoritikal material topologis. Paket ini mereduksi kode numerik yang panjang menjadi baris singkat, menghemat waktu dan tenaga peneliti.

Penelitian ini mengadopsi empat fungsionalitas dari paket PythTB; Konstruksi model, *State sampling*, Analisis topologi, dan Visualisasi. Pada tabel berikut II.4, kami menunjukkan struktur dan fungsionalitas dari kode yang kami kembangkan.

## II.6 Diagram Alur Penelitian

Table II.4: Struktur kode numerik PythTB.

Kode	Fungsi	Keluaran
Model-Hamiltonian.py	Mengonstruksi model sistem <i>tight-binding</i>	Fungsi objek model
Peta-spektrum.py	Memetakan pengaruh gangguan ( <i>disorder</i> ) terhadap efek tepi	Visualisasi peta spektrum energi
Peta-prob.py	Memetakan pengaruh gangguan terhadap probabilitas elektron pada pita <i>bulk</i>	Visualisasi distribusi probabilitas elektron
Dos.py	Memetakan pengaruh gangguan terhadap kerapatan energi ( <i>Density of States</i> )	Peta <i>Density of States</i> (DOS)
Hwf.py	Menganalisis sifat topologi tiga dimensi melalui <i>Wannier functions</i>	Plot evolusi <i>Hybrid Wannier Centers</i> (HWC)
Axion-angle.py	Menganalisis efek topologi melalui respon magnetoelektrik	Plot nilai $\theta$ terhadap parameter $\beta$
Visualisasi.py	Melakukan pemetaan struktur geometri model	Representasi visual struktur kristal

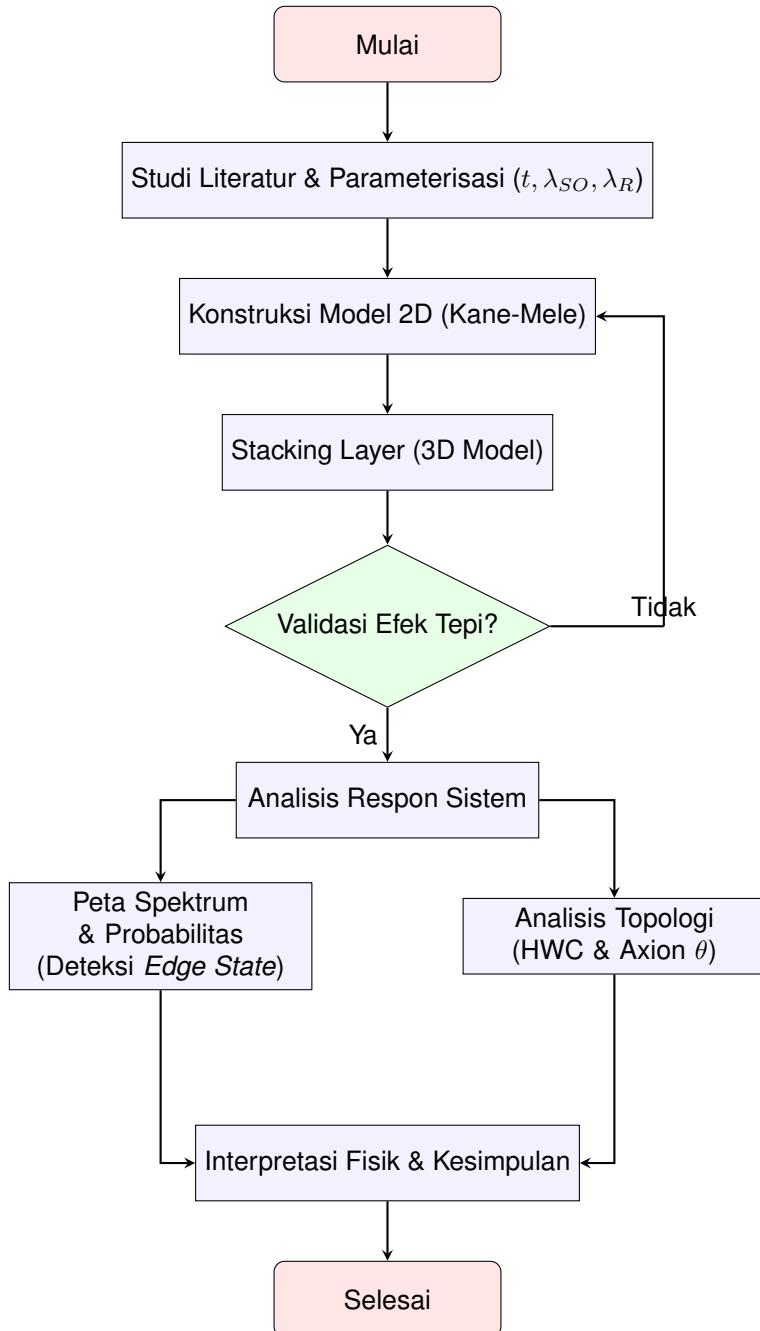


Figure II.2: Diagram alur tahapan penelitian dari konstruksi model hingga analisis topologi.

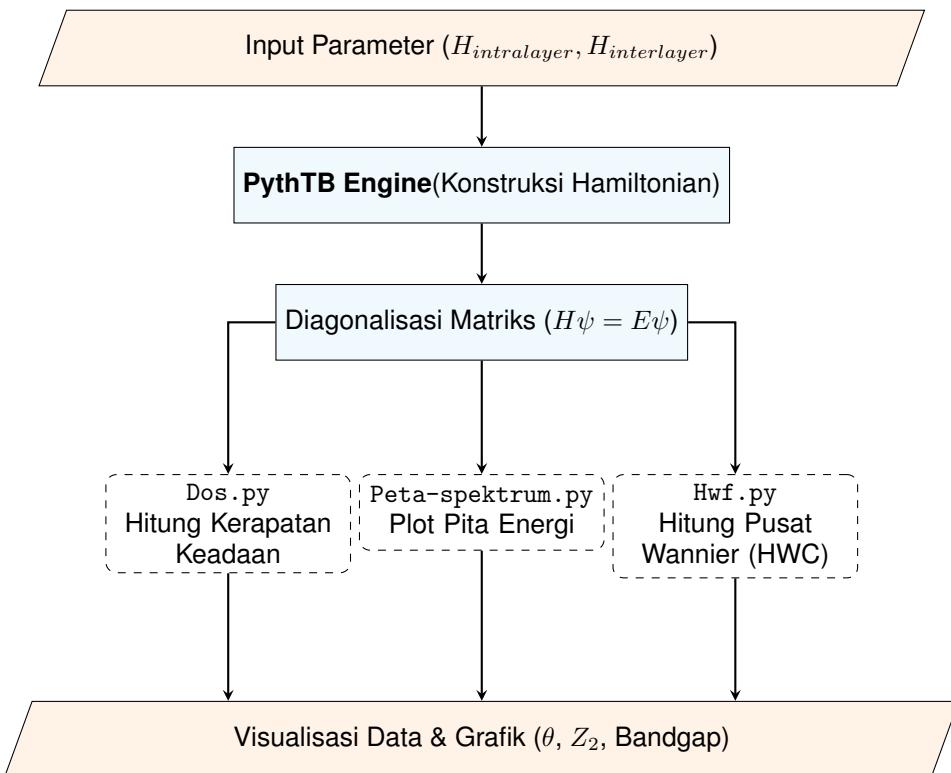


Figure II.3: Skema komputasi numerik menggunakan paket PythTB untuk ekstraksi properti topologi.

## BAB III

### HASIL

#### III.1 Batas kekuatan Disorder

Bagian ini bertujuan untuk menentukan nilai ambang disorder  $W_c$  yang memisahkan antara mode bulk dan mode hall dalam model Kane-Mele 3D. Dua pendekatan digunakan untuk mendeteksi perubahan struktur spektrum ini, yaitu validasi mode hall melalui visualisasi pita dan fungsi Wannier hibrid, serta perhitungan numerik DoS pada energi nol terhadap variasi disorder.

##### III.1.1 Validasi Topologis pada Sistem Bersih

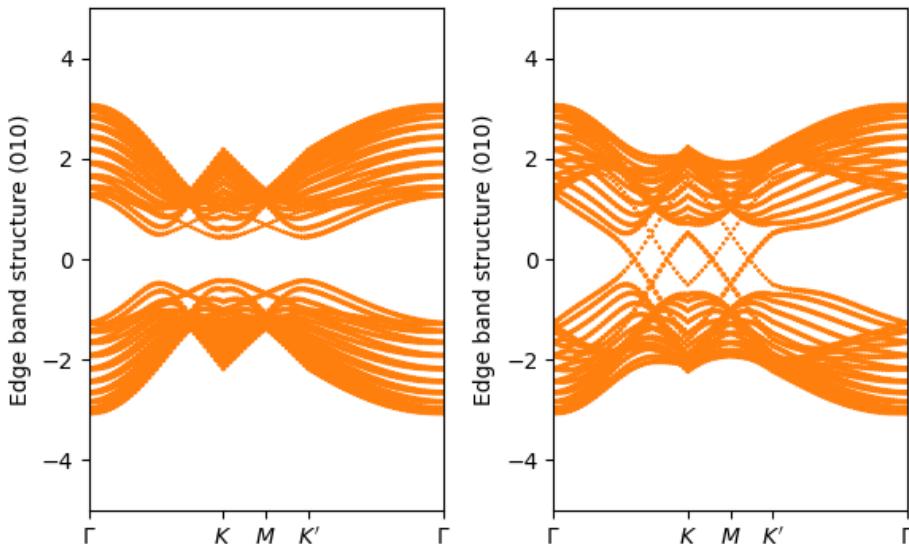


Figure III.1: (a) Mode Trivial sistem(SOC=0.06) (b) Mode Non-Trivial sistem(SOC=0.24)

Untuk memastikan sistem berada dalam fase topologis sebelum disorder ditambahkan, dilakukan perhitungan struktur pita pada geometri slab (010) dan visualisasi fungsi Wannier hibrid pada sistem bulk. pada hasil yang kita peroleh pada gambar III.1 menunjukkan adanya fase topologis pada sistem yang kita amati, hasil kita sesuai dengan model yang diperoleh pada penelitian (Lau, Ortix **and** Brink 2015). pembukaan celah pada sistem ini tidak serta merta menandakan bahwa konduktansi sistem nol. konduktansi pada bulk sistem

memanglah nol, karena elektron terlokalisasi akibat dari kopling intrisik, namun dapat kita lihat bahwa terdapat band yang membelok dari area valensi menuju area konduksi dan sebaliknya, band tersebut menunjukkan adanya konduktansi pada tepian pelat. gambar III.1 juga menunjukkan dispersi pada nilai kopling intrisik rendah, pada grafik tersebut tidak ditunjukkan adanya konduktansi pada tepian. Hal ini menunjukkan peran dari kopling intrisik yang menciptakan simetri pembalikan waktu yang menjaga sistem. Gambar III.2 menunjukkan evolusi pusat

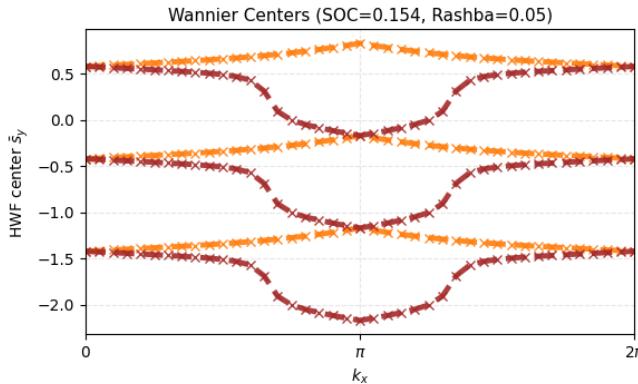


Figure III.2: Evolusi *Hybrid Wannier Function*

fungsi Wannier hibrid sepanjang arah  $y$  terhadap momentum  $k_x$  dalam sistem bersih (tanpa disorder). Pada grafik tersebut, terlihat bahwa pusat-pusat HWF membentuk struktur yang saling berpotongan dan mengalami pergeseran kontinu sepanjang Brillouin zone. Hal ini bersesuaian dengan apa yang di ekspektasikan penelitian(Soluyanov **and** David Vanderbilt 2011) untuk *wannier centers* pada  $Z_2$ .

Pola winding atau “perputaran” pusat HWF terhadap  $k_x$  merupakan indikasi bahwa sistem berada dalam fase topologis non-trivial. Hal ini mencerminkan adanya perubahan muatan topologis secara spasial yang tidak dapat dihapus tanpa menutup celah energi atau memutuskan simetri. Dalam konteks model Kane-Mele, pola ini setara dengan nilai invarian topologi  $\mathbb{Z}_2 = 1$ .

### III.1.2 Transisi Topologis: Plot DoS pada Energi Nol

Untuk mendeteksi degradasi sifat topologis akibat disorder, dilakukan perhitungan densitas keadaan (DoS) pada energi nol ( $E = 0$ ) terhadap variasi kekuatan disorder  $W$ . Dalam sistem topologis, eksistensi celah energi (bandgap) menyebabkan DoS pada  $E = 0$  mendekati nol. Sebaliknya, peningkatan DoS(0) yang signifikan mengindikasikan lokalisasi akibat efek disorder, dan menandakan kemungkinan transisi dari mode hall ke mode bulk, klaim ini kita perkuat dengan

visualisasi dispersi energi pada bagian selanjutnya.

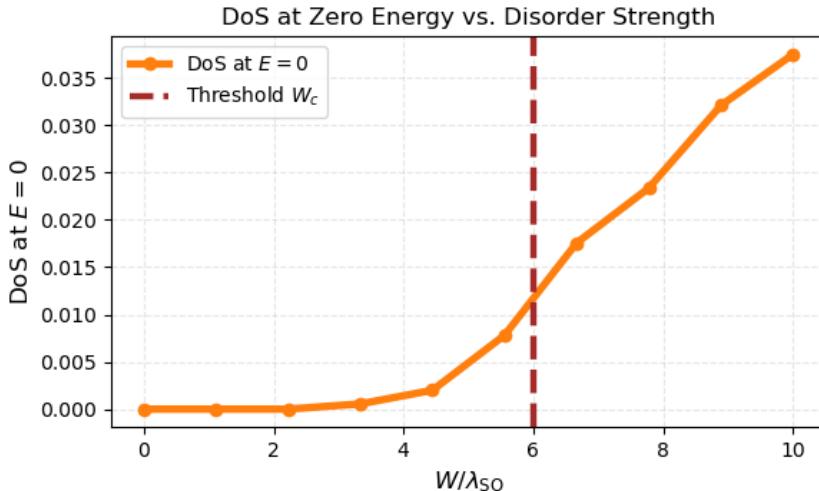


Figure III.3: Plot DoS pada  $E = 0$  terhadap kekuatan disorder  $W/\lambda_{SO}$ .

Gambar III.3 menunjukkan bahwa DoS pada energi nol tetap kecil untuk nilai disorder rendah ( $W < 3.5\lambda_{SO}$ ), mendukung bahwa sistem masih berada dalam mode hall. Namun, terjadi peningkatan yang tajam pada  $W > 3.8\lambda_{SO}$ , yang menandakan lokalisasi dan degradasi karakter topologi. Selanjutnya, pada  $W > 6.0\lambda_{SO}$ , DoS terus meningkat dan mencapai nilai tinggi, mengindikasikan bahwa sistem memasuki mode trivial dengan states lokalisasi pada  $E = 0$ . Dengan demikian, titik transisi disorder diperkirakan berada pada  $W_c \approx 6.3\lambda_{SO}$ .

### III.2 Kerusakan Dispersi Energi dan Hilangnya Edge State Helical

Untuk memvalidasi transisi yang dideteksi melalui perhitungan DoS pada energi nol, dilakukan inspeksi terhadap struktur pita energi (band structure) pada sistem ribbon yang memiliki geometri terbatas secara transversal. Pada sistem topologis, pita energi menampilkan edge state khas yang melintasi celah (bandgap), dikenal sebagai *Helical Edge States*. Edge state ini merupakan tanda utama dari fasa topologis dan menjadi saluran utama untuk transportasi elektronik yang tidak mengalami hamburan balik *Backscattering-free*.

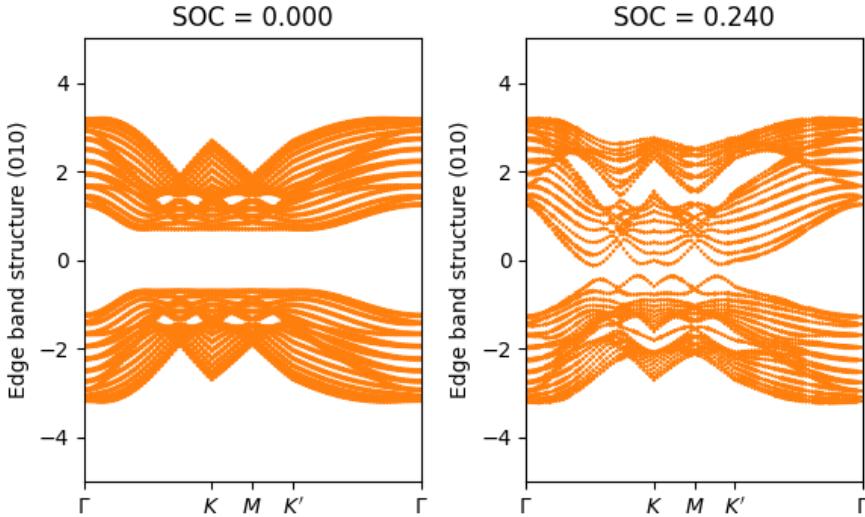


Figure III.4: Struktur pita energi pada  $W = 6.0\lambda_{SO}$ . Tidak tampak lagi lintasan edge state yang menyambung pita valensi dan pita konduksi.

Gambar III.4 menunjukkan bahwa pada  $W = 6.0\lambda_{SO}$ , lintasan edge state yang biasanya melintasi celah energi telah menghilang. Celah energi tetap terlihat secara global, namun tidak lagi terdapat koneksi antara pita valensi dan pita konduksi di dekat energi nol. Hilangnya lintasan ini merupakan indikasi bahwa sistem tidak lagi berada dalam fase topologis. Meskipun DoS menunjukkan peningkatan (menandakan banyaknya states di energi nol), fakta bahwa edge state menghilang dan celah masih ada mengarahkan interpretasi bahwa sistem telah mengalami lokalisasi akibat disorder yang kuat.

Dengan kata lain, meskipun states eksis di sekitar energi nol, mereka tidak terdelokalisasi secara spasial dan tidak dapat menyumbang pada transportasi. Hal ini selaras dengan perhitungan konduktansi yang menunjukkan penurunan drastis pada titik  $W \approx 6.0\lambda_{SO}$ , mengonfirmasi degradasi saluran edge state sebagai konduktor dominan.

### III.3 Peta Spektrum

Untuk memvisualisasikan respon spektrum secara lebih luas, dilakukan pemetaan terhadap sistem pada dua parameter disorder: disorder pada energi on-site ( $W_x$ ) dan disorder hopping ( $W_y$ ). Berdasarkan analisis DoS, band structure, dan konduktansi, spektrum Topologis eksis di daerah dengan  $W_x < 6.0$  dan  $W_y < 5.0$ , sedangkan di luar rentang ini sistem didominasi oleh states yang terlokalisasi.

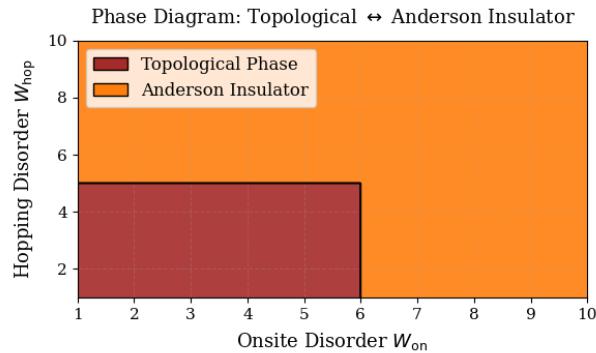


Figure III.5: Peta Spektrum sistem pada bidang parameter disorder. Daerah putih menandakan struktur spektrum topologis, sedangkan daerah gelap merupakan spektrum trivial.

## BAB IV

### KESIMPULAN

#### IV.1 Kesimpulan

Setelah melakukan penelitian ini kami melihat adanya transisi dari struktur spektrum pada sistem Kane-Mele *Stacking* pada titik kekuatan disorder  $6\lambda_{SO}$  setelah titik itu sistem akan bertransisi dari struktur spektrum *Quantum Spin Hall* menuju struktur trivial, hal ini menunjukkan bahwa efek kopling antar layer tidak mempengaruhi kestabilan pada sistem perlayer.

Setelah menganalisa struktur pita pada sistem pada disorder kritis, sistem menunjukkan hilangnya *Helical Edge States* pada struktur *Ribbon*, hal ini memperkuat klaim kita bahwa nilai disorder  $6\lambda_{SO}$  adalah titik transisi yang memisahkan struktur spektrum topologis dan fase trivial. Hasil dari struktur *Ribbon* pita ini menunjukkan bahwa sistem dengan *slab geometry* (010) terlokalisasi yang artinya sistem tidak memasuki fase metalik. Sehingga meskipun analisis Dos menunjukkan kenaikan *Density Of States* pada titik kritis, namun sistem tetap terlokalisasi.

Setelah Menyusun Pemetaan spektrum untuk menunjukkan menunjukkan stabilitas *Quantum Spin Hall* pada model Kane-Mele *Stacking* dengan melakukan *Quench* pada kopling sistem, kami menyimpulkan bahwa sistem ini sangatlah stabil pada daerah disorder yang rendah yang pada aplikasinya merupakan efek dari kecacatan kisi. Hal ini menunjukkan bahwa model ini mampu menunjang *Dissipationless electronics* di masa depan.

#### IV.2 Saran

Kami Sangatlah mengharapkan kelanjutan dari penelitian ini, agar lebih siap menuju aplikasi industrial. Salah satu *Gap* utama dari penelitian ini adalah tidak adanya analisis dari konduktansi yang sangat vital pada topik ini, alasan dari tidak dilakukannya analisis ini adalah keterbatasan waktu dan kompleksitas dari analisis tersebut.

## DAFTAR PUSTAKA

- Adams, Allan (18 june 2014). *Lecture 8: Quantum Harmonic Oscillator*. 8.04 Quantum Physics I, Spring 2013. MIT OpenCourseWare. URL: <https://www.youtube.com/watch?v=qu-jyrwW6hw> (**urlseen** 25/02/2026).
- Berry, Michael Victor (march 1984). “Quantal phase factors accompanying adiabatic changes”. *inProceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*: 392.1802, **pages** 45–57. ISSN: 0080-4630. DOI: 10 . 1098 / rspa . 1984 . 0023. eprint: <https://royalsocietypublishing.org/rspa/article-pdf/392/1802/45/65511/rspa.1984.0023.pdf>. URL: <https://doi.org/10.1098/rspa.1984.0023>.
- Castro Neto, A. H. **and others** (january 2009). “The electronic properties of graphene”. *inRev. Mod. Phys.*: 81 (1), **pages** 109–162. DOI: 10 . 1103 / RevModPhys.81.109. URL: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>.
- Chang, Cui-Zu **and others** (2015). “High-precision realization of robust quantum anomalous Hall state in a hard ferromagnetic topological insulator”. *inNature Physics*: 11.3, **pages** 305–310. DOI: 10.1038/nphys3217.
- Coh, S. **and** D. Vanderbilt (2022). *Python Tight Binding (PythTB)*. DOI: 10.5281 / zenodo.12721315. URL: <https://doi.org/10.5281/zenodo.12721315>.
- Cole, Trey, Sinisa Coh **and** David Vanderbilt (november 2025). *Python Tight Binding (PythTB)*. **version** 2.0.0. DOI: 10 . 5281 / zenodo . 12721315. URL: <https://zenodo.org/records/12721315>.
- Cole, Trey **and** David Vanderbilt (may 2025). “Reduced Wannier representation for topological bands”. *inPhys. Rev. B*: 111 (20), **page** 205139. DOI: 10.1103 / PhysRevB . 111 . 205139. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.111.205139>.
- Essin, Andrew M., Joel E. Moore **and** David Vanderbilt (april 2009). “Magnetolectric Polarizability and Axion Electrodynamics in Crystalline Insulators”. *inPhys. Rev. Lett.*: 102 (14), **page** 146805. DOI: 10 . 1103 / PhysRevLett . 102 . 146805. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.102.146805>.
- Fu, Liang, C. L. Kane **and** E. J. Mele (march 2007). “Topological Insulators in Three Dimensions”. *inPhys. Rev. Lett.*: 98 (10), **page** 106803. DOI: 10.1103 / PhysRevLett . 98 . 106803. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.98.106803>.
- Fukui, Takahiro **and** Yasuhiro Hatsugai (march 2007). “Topological aspects of the quantum spin-Hall effect in graphene:  $Z_2$  topological order and spin Chern number”. *inPhys. Rev. B*: 75 (12), **page** 121403. DOI: 10.1103/PhysRevB.75.121403. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.75.121403>.

- Fukui, Takahiro, Yasuhiro Hatsugai **and** Hiroshi Suzuki (2005). "Chern Numbers in Discretized Brillouin Zone: Efficient Method of Computing (Spin) Hall Conductances". *inJournal of the Physical Society of Japan*: 74.6, **pages** 1674–1677. DOI: 10.1143/JPSJ.74.1674. eprint: <https://doi.org/10.1143/JPSJ.74.1674>. URL: <https://doi.org/10.1143/JPSJ.74.1674>.
- Gresch, Dominik **and others (february 2017)**. "Z2Pack: Numerical implementation of hybrid Wannier centers for identifying topological materials". *inPhys. Rev. B*: 95 (7), **page** 075146. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.075146. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.075146>.
- Grosso, Giuseppe **and** Giuseppe Pastori Parravicini (2014). "Chapter 1 - Electrons in One-Dimensional Periodic Potentials". *inSolid State Physics (Second Edition)*: **byeditor**Giuseppe Grosso **and** Giuseppe Pastori Parravicini. Second Edition. Amsterdam: Academic Press, **pages** 1–65. ISBN: 978-0-12-385030-0. DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-385030-0.00001-3>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780123850300000013>.
- Haldane, F. D. M. (**october 1988**). "Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly"". *inPhys. Rev. Lett.*: 61 (18), **pages** 2015–2018. DOI: 10.1103/PhysRevLett.61.2015. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.2015>.
- Kane, C. L. **and** E. J. Mele (**september 2005a**). " $Z_2$  Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect". *inPhys. Rev. Lett.*: 95 (14), **page** 146802. DOI: 10.1103/PhysRevLett.95.146802. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.146802>.
- (**november 2005b**). "Quantum Spin Hall Effect in Graphene". *inPhys. Rev. Lett.*: 95 (22), **page** 226801. DOI: 10.1103/PhysRevLett.95.226801. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.226801>.
- Kittel, Charles (1955). *Solid state physics*. **volume** 3. Shell Development Company Emeryville.
- Klitzing, K. v., G. Dorda **and** M. Pepper (**august 1980**). "New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance". *inPhys. Rev. Lett.*: 45 (6), **pages** 494–497. DOI: 10.1103/PhysRevLett.45.494. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.45.494>.
- Lau, Alexander, Carmine Ortix **and** Jeroen van den Brink (**february 2015**). "One-dimensional Dirac electrons on the surface of weak topological insulators". *inPhys. Rev. B*: 91 (8), **page** 085106. DOI: 10.1103/PhysRevB.91.085106. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.91.085106>.
- MIT OpenCourseWare (17 **may 2019**). *Student Video: Tight Binding Model*. YouTube. URL: <https://www.youtube.com/watch?v=vGyHgaXnAMA> (**urlseen 25/02/2026**).

- Nadeem, Muhammad **and others** (2021). "Overcoming Boltzmann's Tyranny in a Transistor via the Topological Quantum Field Effect". *inNano Letters*: 21.7. Epub 2021 Mar 29, **pages** 3155–3161. DOI: 10.1021/acs.nanolett.1c00378.
- Novoselov, K. S. **and others** (2005). "Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene". *inNature*: 438.7065, **pages** 197–200. DOI: 10.1038/nature04233. URL: <https://doi.org/10.1038/nature04233>.
- Painter, G. S. **and** D. E. Ellis (**june** 1970). "Electronic Band Structure and Optical Properties of Graphite from a Variational Approach". *inPhys. Rev. B*: 1 (12), **pages** 4747–4752. DOI: 10.1103/PhysRevB.1.4747. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.1.4747>.
- Professor Nano (22 **january** 2025). *Deriving Berry phase, Berry connection & Berry curvature*. YouTube. URL: <https://www.youtube.com/watch?v=6xctcmwR8wo> (**urlseen** 25/02/2026).
- Qi, Xiao-Liang, Taylor L. Hughes **and** Shou-Cheng Zhang (**november** 2008). "Topological field theory of time-reversal invariant insulators". *inPhys. Rev. B*: 78 (19), **page** 195424. DOI: 10.1103/PhysRevB.78.195424. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.195424>.
- Soluyanov, Alexey A. **and** David Vanderbilt (**january** 2011). "Wannier representation of  $\mathbb{Z}_2$  topological insulators". *inPhys. Rev. B*: 83 (3), **page** 035108. DOI: 10.1103/PhysRevB.83.035108. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.035108>.
- Thouless, D. J. **and others** (**august** 1982). "Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential". *inPhys. Rev. Lett.*: 49 (6), **pages** 405–408. DOI: 10.1103/PhysRevLett.49.405. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.49.405>.
- Vanderbilt, David (2018). *Berry Phases in Electronic Structure Theory: Electric Polarization, Orbital Magnetization and Topological Insulators*. Cambridge University Press Monographs on Mathematical Physics. Cambridge University Press. ISBN: 978-0-521-85500-3. URL: <https://doi.org/10.1017/9781316662205>.
- (2 **august** 2021). *Theory of electric polarization: Berry phases and Wannier functions...with Prof. David Vanderbilt*. Kuliah tamu pada ajang APCTP School. APCTP (Asia Pacific Center for Theoretical Physics). URL: [https://youtu.be/QX\\_GM85-eWM](https://youtu.be/QX_GM85-eWM) (**urlseen** 22/05/2024).
- Wallace, P. R. (**may** 1947). "The Band Theory of Graphite". *inPhys. Rev.*: 71 (9), **pages** 622–634. DOI: 10.1103/PhysRev.71.622. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.71.622>.
- Wilczek, Frank (**may** 1987). "Two applications of axion electrodynamics". *inPhys. Rev. Lett.*: 58 (18), **pages** 1799–1802. DOI: 10.1103/PhysRevLett.58.1799. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.58.1799>.

Yu, Rui **and others (august 2011)**. “Equivalent expression of  $\mathbb{Z}_2$  topological invariant for band insulators using the non-Abelian Berry connection”. *inPhys. Rev. B*: 84 (7), **page** 075119. DOI: 10 . 1103 / PhysRevB . 84 . 075119. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.075119>.

## BAB A

### Derivasi Matematis

#### A.1 Tight Binding Model

Derivasi pada bagian ini mengikuti (MIT OpenCourseWare 2019)

Persamaan Schrodinger untuk potensial *single atom*: $U(r)$

$$\left[ \frac{p^2}{2m} + U(r) \right] \phi(r) = E_0 \phi(r) \quad (\text{A.1})$$

$$\phi^*(r) \left[ \frac{p^2}{2m} + U(r) \right] \phi(r) = \phi^*(r) E_0 \phi(r) \quad (\text{A.2})$$

Dengan menambahkan pengaruh dari atom lain:

$$\psi_k(r) = \sum_j b_k(r_j) \phi_k(r - r_j) \quad (\text{A.3})$$

$$\psi(r + R_l) = e^{ik \cdot R_l} \psi(r), \quad (\text{Teori Bloch}) \quad (\text{A.4})$$

$$\sum_j b_k(r_j) \phi(r - r_j + R_l) = e^{ik \cdot R_l} \sum_j b_k(r_j) \phi(r - r_j) \quad (\text{A.5})$$

Dengan mengsubstitusi  $R_p = r_j - R_l$

$$b_k(R_p + R_l) = e^{ik \cdot R_l} b_k(R_p) \quad (\text{A.6})$$

$$b_k(R_l) = e^{ik \cdot R_l} b_k(0) \quad (\text{A.7})$$

$$b_k(r_j) = e^{ik \cdot r_j} b_k(0) \quad (\text{A.8})$$

Normalisasi Fungsi Gelombang:

$$\int d^3r \psi_k^*(\mathbf{r}) \psi_k(\mathbf{r}) = 1 \quad (\text{A.9})$$

$$1 = \sum_{r_j} b_k^*(r_j) \sum_{R_l} b_k^*(R_l) \int d^3r \phi_k^*(r - r_j) \phi_k(r - R_l) \quad (\text{A.10})$$

$$1 = b_k^*(0)b_k(0) \sum_{r_j} e^{ik \cdot r_j} \sum_{R_l} e^{ik \cdot R_l} \int d^3r \phi_k^*(r - r_j) \phi_k(r - R_l) \quad (\text{A.11})$$

$$1 = Nb_k^*(0)b_k(0) \sum_{R_p} e^{-ik \cdot R_p} \int d^3r \phi_k^*(r - R_p) \phi_k(r) \quad (\text{A.12})$$

$$\left[ 1 = Nb_k^*(0)b_k(0) \sum_{R_p} e^{-ik \cdot R_p} \int d^3r \phi_k^*(r - R_p) \phi_k(r) \right]^* \quad (\text{A.13})$$

$$1 = Nb_k^*(0)b_k(0) \sum_{R_p} e^{ik \cdot R_p} \int d^3r \phi_k^*(r) \phi_k(r - R_p) \quad (\text{A.14})$$

$$b_k^*(0)b_k(0) = \frac{1}{N} \cdot \frac{1}{1 + \sum_{R_p} e^{ik \cdot R_p} \alpha_k(R_p)} \quad (\text{A.15})$$

$$b_k(0) \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (\text{A.16})$$

$$\psi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ik \cdot r_j} \phi_k(r - r_j) \quad (\text{A.17})$$

Maka *first order correction* dari energi:

$$\psi_k^*(r) H \psi_k = \frac{1}{N} \sum_j \sum_m e^{ik \cdot (r_j - r_m)} \int \phi^*(r - r_m) H \phi(r - r_j) dr \quad (\text{A.18})$$

$$\psi_k^*(r) H \psi_k = \sum_n e^{-ik \cdot \rho(n)} \int \phi^*(r) H \phi(r - r_j) \quad (\text{A.19})$$

Misal  $\gamma = \phi^*(r) H \phi(r - r_j)$ , dan basis orbital lokal  $|f_n\rangle = |\phi_a(r - r_j)\rangle$  maka Hamiltonian Tight Binding dapat kita modelkan sebagai

$$H = E_0 \sum_n |f_n\rangle \langle f_n| + \gamma \sum_n [|f_n\rangle \langle f_{n+1}| + |f_{n+1}\rangle \langle f_n|] \quad (\text{A.20})$$

$$H = \sum_n a_n |f_n\rangle \langle f_n| + \sum_n b_{n+1} [|f_n\rangle \langle f_{n+1}| + |f_{n+1}\rangle \langle f_n|] \quad (\text{A.21})$$

$$(A.22)$$

## A.2 Operator Kreasi dan Anihilasi

Derivasi mengikuti (Adams 2014)

Hamiltonian osilator harmonik kuantum satu dimensi:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (\text{A.23})$$

Faktorisasi persamaan Hamiltonian dengan mendefinisikan operator  $a$  dan  $a^\dagger$ :

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x + \frac{i}{m\omega}p \right) \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x - \frac{i}{m\omega}p \right) \quad (\text{A.24})$$

Komutator dari operator  $a$  dan  $a^\dagger$  dengan relasi  $[x,p]=i$ :

$$[a, a^\dagger] = \frac{m\omega}{2\hbar} \left[ x + \frac{i}{m\omega}p, x - \frac{i}{m\omega}p \right] \quad (\text{A.25})$$

$$[a, a^\dagger] = \frac{m\omega}{2\hbar} \left( -\frac{i}{m\omega}[x, p] + \frac{i}{m\omega}[p, x] \right) \quad (\text{A.26})$$

$$[a, a^\dagger] = \frac{m\omega}{2\hbar} \left( -\frac{i}{m\omega}(i\hbar) + \frac{i}{m\omega}(-i\hbar) \right) \quad (\text{A.27})$$

$$[a, a^\dagger] = \frac{m\omega}{2\hbar} \left( \frac{\hbar}{m\omega} + \frac{\hbar}{m\omega} \right) = 1 \quad (\text{A.28})$$

Substitusi perkalian operator ke dalam Hamiltonian:

$$a^\dagger a = \frac{m\omega}{2\hbar} \left( x - \frac{i}{m\omega}p \right) \left( x + \frac{i}{m\omega}p \right) \quad (\text{A.29})$$

$$a^\dagger a = \frac{m\omega}{2\hbar} \left( x^2 + \frac{p^2}{m^2\omega^2} + \frac{i}{m\omega}[x, p] \right) \quad (\text{A.30})$$

$$a^\dagger a = \frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \frac{p^2}{2m\hbar\omega} - \frac{1}{2} \quad (\text{A.31})$$

$$\hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (\text{A.32})$$

Hamiltonian dalam bentuk operator jumlah partikel  $N=a^\dagger a$ :

$$H = \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{A.33})$$

Komutator Hamiltonian terhadap operator  $a$  dan  $a^\dagger$ :

$$[H, a] = \hbar\omega[a^\dagger a, a] = -\hbar\omega a \quad [H, a^\dagger] = \hbar\omega[a^\dagger a, a^\dagger] = \hbar\omega a^\dagger \quad (\text{A.34})$$

Aplikasi operator pada nilai eigen energi  $H|n\rangle=E_n|n\rangle$ :

$$H(a^\dagger|n\rangle) = (E_n + \hbar\omega)(a^\dagger|n\rangle) \quad H(a|n\rangle) = (E_n - \hbar\omega)(a|n\rangle) \quad (\text{A.35})$$

Aksi operator kreasi (menciptakan partikel/eksitasi) dan anihilasi (memusnahkan):

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad a|n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (\text{A.36})$$

Dari operator ini kita dapat menuliskan kembali model Tight-Binding A.1,

$$H = \sum_i \epsilon a_i^\dagger a_i - t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + \text{H.c.})$$

### A.3 Derivasi Fase Berry, Koneksi Berry, dan Kelengkungan Berry

Derivasi berikut mengikuti langkah-langkah pada video (Professor Nano 2025)

Misalkan Hamiltonian  $H(R)$  berevolusi secara adiabatik, maka;

$$H(\bar{R}(t)) = H(r_1(t), r_2(t), \dots) \quad (\text{A.37})$$

Persamaan Schrodinger bergantung waktu;

$$H|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \quad (\text{A.38})$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle ; \quad H|n\rangle = E_n |n\rangle \quad (\text{A.39})$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \quad (\text{A.40})$$

Kembali kepada hamiltonian  $H(R)$

$$H(\bar{R}(t))|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \quad (\text{A.41})$$

$$H(\bar{R}(t))|n, \bar{R}(t)\rangle = E_n(\bar{R}(t))|n, \bar{R}(t)\rangle \quad (\text{A.42})$$

$$t = 0 \rightarrow |\psi(0)\rangle = |n, \bar{R}(0)\rangle \quad (\text{A.43})$$

Apabila kita asumsikan bahwa solusi dari sistem ini hanya terdiri dari fase dinamis, maka:

$$|\psi(t)\rangle = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\bar{R}(s)) ds \right] |n, \bar{R}(t)\rangle \quad (\text{A.44})$$

subtitusi,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = E_n(\vec{R}(t)) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\vec{R}(s)) ds \right] |n, \vec{R}(t)\rangle \quad (\text{A.45})$$

$$+ \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\vec{R}(s)) ds \right] i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n, \vec{R}(t)\rangle \quad (\text{A.46})$$

$$= E_n(\vec{R}(t)) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\vec{R}(s)) ds \right] |n, \vec{R}(t)\rangle \quad (\text{A.47})$$

$$+ \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\vec{R}(s)) ds \right] i\hbar \dot{\vec{R}}(t) \frac{\partial}{\partial \vec{R}} |n, \vec{R}(t)\rangle \quad (\text{A.48})$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(\vec{R}(t)) |\psi(t)\rangle \quad (\text{A.49})$$

$$+ \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\vec{R}(s)) ds \right] i\hbar \dot{\vec{R}}(t) \frac{\partial}{\partial \vec{R}} |n, \vec{R}(t)\rangle \quad (\text{A.50})$$

$i\hbar \dot{\vec{R}}(t) \frac{\partial}{\partial \vec{R}} |n, \vec{R}(t)\rangle$  harus nol untuk memenuhi persamaan Schrodinger. Untuk itu kita memerlukan tambahan fase pada solusi tebakan;

$$|\psi(t)\rangle = \exp[i\gamma_n(t)] \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\vec{R}(s)) ds \right] |n, \vec{R}(t)\rangle \quad (\text{A.51})$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = -\hbar \frac{d\gamma_n(t)}{dt} |\Psi(t)\rangle + E_n(\vec{R}(t)) |\Psi(t)\rangle \quad (\text{A.52})$$

$$+ \exp \left[ i\gamma_n(t) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\vec{R}(s)) ds \right] i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n, \vec{R}(t)\rangle \quad (\text{A.53})$$

$$(A.54)$$

Untuk memenuhi persamaan Schrodinger,  $-\hbar \frac{d\gamma_n(t)}{dt} |\Psi(t)\rangle$  dan  $\exp \left[ i\gamma_n(t) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\vec{R}(s)) ds \right] i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n, \vec{R}(t)\rangle$  harus menjadi nol.

$$-\hbar \frac{d\gamma_n(t)}{dt} |\Psi(t)\rangle = \exp \left[ i\gamma_n(t) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\vec{R}(s)) ds \right] i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n, \vec{R}(t)\rangle \quad (\text{A.55})$$

$$-\hbar \frac{d\gamma_n(t)}{dt} |\Psi(t)\rangle = \exp \left[ i\gamma_n(t) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\vec{R}(s)) ds \right] i\hbar \dot{\vec{R}} \cdot \nabla_{\vec{R}} |n, \vec{R}(t)\rangle \quad (\text{A.56})$$

$$\frac{d\gamma_n(t)}{dt} |n, \vec{R}(t)\rangle = i \dot{\vec{R}} \cdot \nabla_{\vec{R}} |n, \vec{R}(t)\rangle \quad (\text{A.57})$$

$$\frac{d\gamma_n(t)}{dt} \langle n, \vec{R}(t) | n, \vec{R}(t) \rangle = i \dot{\vec{R}} \cdot \langle n, \vec{R}(t) | \nabla_{\vec{R}} | n, \vec{R}(t) \rangle \quad (\text{A.58})$$

$$\frac{d\gamma_n(t)}{dt} = i \dot{\vec{R}} \cdot \langle n, \vec{R}(t) | \nabla_{\vec{R}} | n, \vec{R}(t) \rangle \quad (\text{A.59})$$

$$\gamma_n(t) = i \int_0^t ds \dot{\vec{R}}(s) \langle n, \vec{R}(s) | \nabla_{\vec{R}} | n, \vec{R}(s) \rangle \quad (\text{A.60})$$

$$= i \int_{\vec{R}_1}^{\vec{R}_2} d\vec{R} \langle n, \vec{R} | \nabla_{\vec{R}} | n, \vec{R} \rangle \quad (\text{A.61})$$

Fase Berry  $\gamma_n$  harus real untuk memenuhi konversasi probabilitas gelombang.

$$\gamma_n = \int_{\vec{R}_1}^{\vec{R}_2} d\vec{R} \cdot i \langle n, \vec{R} | \nabla_{\vec{R}} | n, \vec{R} \rangle \quad (\text{A.62})$$

$$= \int_{s_1}^{s_2} ds \frac{d\vec{R}(s)}{ds} \cdot i \langle n, \vec{R} | \nabla_{\vec{R}} | n, \vec{R} \rangle \quad (\text{A.63})$$

$$\text{Fakta bahwa: } \frac{d}{ds} |n, \vec{R}(s)\rangle = \left( \nabla_{\vec{R}} |n, \vec{R}\rangle \right) \cdot \frac{d\vec{R}(s)}{ds} \quad (\text{A.64})$$

$$\gamma_n = \int_{s_1}^{s_2} ds i \left\langle n, \vec{R} \left| \frac{d}{ds} \right| n, \vec{R} \right\rangle \quad (\text{A.65})$$

$\langle n, \vec{R}   n, \vec{R} \rangle = 1$	$\frac{d}{ds} \langle n, \vec{R}   n, \vec{R} \rangle = 0$	$\frac{d}{ds} \langle n, \vec{R}   = \left( \frac{d}{ds}  n, \vec{R}\rangle \right)^\dagger$
---	--	--

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \langle n, \vec{R}(s) | n, \vec{R}(s) \rangle &= \frac{d}{ds} \langle n, \vec{R} | |n, \vec{R}\rangle + \langle n, \vec{R} | \frac{d}{ds} | n, \vec{R} \rangle \\ &= 2 \operatorname{Re} \left[ \langle n, \vec{R} | \frac{d}{ds} | n, \vec{R} \rangle \right] \\ &= 0 \end{aligned}$$

Karena  $\langle n, \vec{R} | \frac{d}{ds} | n, \vec{R} \rangle$  sama dengan 0, maka fase berry  $\gamma_n$  harus real

Isi integral dari fase berry disebut koneksi Berry  $\vec{A}_n(\vec{R})$  yang dapat dipandang

sebagai sebuah medan vector.

$$A_{n,\mu}(\vec{R}) = i\langle n, \vec{R} | \frac{\partial}{\partial r_\mu} | n, \vec{R} \rangle \quad (\text{A.66})$$

Misal koneksi Berry diberikan sebagai  $\vec{A}_n(k) = i\langle n_{\vec{k}} | \nabla | n_{\vec{k}} \rangle$  dan mengaplikasikan projector  $\hat{P}_{\vec{k}} = | n_{\vec{k}} \rangle \langle n_{\vec{k}} |$

$$\boxed{\vec{A}_n(\vec{k}) = i\text{Tr}[\hat{P}_{\vec{k}} \nabla_{\vec{k}} \hat{P}_{\vec{k}}]} \quad \boxed{\hat{P}_{\vec{k}} = | n_{\vec{k}} \rangle \langle n_{\vec{k}} |}$$

$$\begin{aligned} \gamma_n &= \int_{\vec{k}_1}^{\vec{k}_2} \vec{A}_n(\vec{k}) \cdot d\vec{k} \approx \sum_{j=0}^{N-1} \vec{A}_n(\vec{k}_j) \cdot d\vec{k}_j = i \sum_{j=0}^{N-1} \text{Tr}[\hat{P}_{\vec{k}_j} \nabla_{\vec{k}} \hat{P}_{\vec{k}_j}] \cdot d\vec{k}_j \\ &= i \sum_{j=0}^{N-1} \text{Tr}[\hat{P}_{\vec{k}_j} (\nabla_{\vec{k}} \hat{P}_{\vec{k}_j}) \cdot d\vec{k}_j] \approx i \sum_{j=0}^{N-1} \text{Tr}[\hat{P}_{\vec{k}_j} (\hat{P}_{\vec{k}_{j+1}} - \hat{P}_{\vec{k}_j})] \\ &= i \sum_{j=0}^{N-1} \langle n_{\vec{k}_j} | n_{\vec{k}_{j+1}} \rangle - 1 \end{aligned}$$

### Parallel transport

$$\boxed{\langle n_{\vec{k}_j} | n_{\vec{k}_{j+1}} \rangle = 1 - i\vec{A}_n(\vec{k}_j) \cdot d\vec{k}_j}$$

Koneksi Berry  $A_n(k)$  bersifat gauge-dependent, dimana transformasinya menghasilkan suku gradient fase  $\nabla_k \phi(k) \vec{A}_n(\vec{k}) \xrightarrow{\text{Gauge}} \vec{A}_n(\vec{k}) + \nabla_{\vec{k}} \phi(k)$ . Untuk itu, kelengkungan Berry diberikan untuk memberikan parameter yang gauge-invariant.

$$\begin{aligned} \vec{\Omega}_n(\vec{k}) &\equiv \nabla \times \vec{A}_n(\vec{k}) \\ \vec{\Omega}_n(\vec{k}) &\xrightarrow{\text{Gauge}} \vec{\Omega}_n(\vec{k}) \end{aligned}$$

## A.4 Formulasi Wannier Center

Derivas berikut berlandaskan dari sumber; (David Vanderbilt 2021) (David Vanderbilt 2018)

### Bloch State

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.67})$$

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.68})$$

Normalisasi:

$$\langle \psi_{n\mathbf{k}'} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = \frac{(2\pi)^3}{V} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{A.69})$$

### Definisi Wannier Function

$$|w_{n0}\rangle = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{BZ}} d^3k |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \quad (\text{A.70})$$

Substitusi bentuk Bloch:

$$|w_{n0}\rangle = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{BZ}} d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle \quad (\text{A.71})$$

### Identitas Operator Posisi

$$\mathbf{r}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = i\nabla_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{A.72})$$

### Aksi Operator Posisi

$$\mathbf{r}|w_{n0}\rangle = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{BZ}} d^3k \mathbf{r}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle \quad (\text{A.73})$$

$$= i \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{BZ}} d^3k \nabla_{\mathbf{k}} (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) |u_{n\mathbf{k}}\rangle \quad (\text{A.74})$$

Integrasi parsial di ruang  $\mathbf{k}$ :

$$= i \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{BZ}} d^3k \nabla_{\mathbf{k}} (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle) \quad (\text{A.75})$$

$$- i \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{BZ}} d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{k}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle \quad (\text{A.76})$$

Dengan periodisitas pada batas BZ, suku permukaan hilang:

$$\mathbf{r}|w_{n0}\rangle = i \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{BZ}} d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{k}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle \quad (\text{A.77})$$

### Ekspektasi Nilai Posisi

$$\langle w_{n0} | \mathbf{r} | w_{n0} \rangle = i \left( \frac{V}{(2\pi)^3} \right)^2 \int_{BZ} d^3 k \int_{BZ} d^3 k' \langle u_{n\mathbf{k}'} | e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \quad (A.78)$$

Gunakan ortogonalitas Bloch state:

$$\langle \psi_{n\mathbf{k}'} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = \frac{(2\pi)^3}{V} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (A.79)$$

Sehingga diperoleh:

$$\langle w_{n0} | \mathbf{r} | w_{n0} \rangle = i \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d^3 k \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} \rangle \quad (A.80)$$

### Definisi Berry Connection

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{k}) = i \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} \rangle \quad (A.81)$$

### Hasil Akhir

$$\mathbf{r}_n = \langle w_{n0} | \mathbf{r} | w_{n0} \rangle = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d^3 k \mathbf{A}_n(\mathbf{k}) \quad (A.82)$$

## BAB B

### Lampiran Kode Program

#### B.1 Kode Utama Simulasi(Model Kane-Mele 3D)

Berikut adalah kode utama yang memodelkan sistem yang kita teliti dalam lingkungan PyhTB, dijadikan sebagai fungsi model yang dipanggil pada kode-kode analisis berikutnya:

Listing B.1: Model Stacking Graphene

```
1 from pyhtb import TBModel, Lattice
2 import numpy as np
3
4 def set_model(t, soc, rashba, delta, W):
5     sigma_z = np.array([0., 0., 0., 1.])
6     sigma_x = np.array([0., 1., 0., 0])
7     sigma_y = np.array([0., 0., 1., 0])
8
9     r3h = np.sqrt(3.0) / 2.0
10    sigma_a = 0.5 * sigma_x - r3h * sigma_y
11    sigma_b = 0.5 * sigma_x + r3h * sigma_y
12    sigma_c = -1.0 * sigma_x
13
14    lat = [[1, 0, 0], [0.5, np.sqrt(3.0)/2.0, 0.0], [0.0, 0.0,
15          1.0]]
16    orb = [[1./3., 1./3., 0.0], [2./3., 2./3., 0.0]]
17    lattice = Lattice(lat_vecs=lat, orb_vecs=orb, periodic_dirs
18                      =...)
19    model = TBModel(lattice=lattice, spinful=True)
20
21    disorder_values = np.random.uniform(-W/2, W/2, size=len(orb
22          ))
23    onsite_energies = [
24        delta + disorder_values[i] if i % 2 == 0 else -delta +
25            disorder_values[i]
26
27        for i in range(len(orb))
28    ]
29    model.set_onsite(onsite_energies)
30
31    # Hopping terms
32
33    for lvec in ([0, 0, 0], [-1, 0, 0], [0, -1, 0]):
```

```

30     model.set_hop(t, 0, 1, lvec)
31
32     for lvec in ([1, 0, 0], [-1, 1, 0], [0, -1, 0]):
33
34         model.set_hop(soc * 1.j * sigma_z, 0, 0, lvec)
35
36     for lvec in([-1, 0, 0], [1, -1, 0], [0, 1, 0]):
37
38         model.set_hop(soc * 1.j * sigma_z, 1, 1, lvec)
39
40     model.set_hop(0.1 * soc * 1j * sigma_z, 1, 1, [0, 0, 1])
41     model.set_hop(-0.1 * soc * 1j * sigma_z, 0, 0, [0, 0, 1])
42
43     model.set_hop(1.j * rashba * sigma_a, 0, 1, [0, 0, 0], mode
44                   ="add")
45     model.set_hop(1.j * rashba * sigma_b, 0, 1, [-1, 0, 0],
46                   mode="add")
47     model.set_hop(1.j * rashba * sigma_c, 0, 1, [0, -1, 0],
48                   mode="add")
49
50     return model
51
52
53 model = set_model(1.0, 0.3, 0.1, 1.0, 0.0)
54 model.info()

```

## B.2 Kode Validasi Model

Berikut adalah kode yang kami gunakan untuk memvalidasi model:

Listing B.2: Visualisasi Kristal

```

1
2 from pythtb import TBModel, Lattice
3 import numpy as np
4 import matplotlib
5 matplotlib.use('TkAgg')
6 import matplotlib.pyplot as plt
7 import plotly.express as px
8 from HamiltonianModel.hamiltonian import set_model
9
10 delta = 0.0
11 t = 1.0
12 soc_list = np.array([0.06, 0.24])
13 soc_val = 0.125

```

```

14 rashba = 0.05
15 W = 0 * soc_list
16
17 # Matriks Pauli
18 sigma_z = np.array([0., 0., 0., 1.])
19 sigma_x = np.array([0., 1., 0., 0.])
20 sigma_y = np.array([0., 0., 1., 0.])
21 r3h = np.sqrt(3.0) / 2.0
22 sigma_a = 0.5 * sigma_x - r3h * sigma_y
23 sigma_b = 0.5 * sigma_x + r3h * sigma_y
24 sigma_c = -1.0 * sigma_x
25
26 data_csv = []
27 my_model = set_model(t, soc_val, rashba, delta, 0)
28
29 print(my_model)
30 my_model.info()
31
32 sc_model = my_model.make_supercell([[2, 1, 0], [-1, 2, 0], [0,
33   0, 2]], to_home=True)
34 slab_model = sc_model.cut_piece(3,1, glue_edges=False)
35 pos = slab_model.get_orb_vecs()
36 z_vals = pos[:,2]
37 z_unique = np.unique(np.round(z_vals, 5))
38 colors_layer = ["red", "green", "blue", "orange", "purple"]
39 color_site = []
40
41 for z in z_vals:
42     idx = np.where(z_unique == np.round(z,5))[0][0]
43     color_site.append(colors_layer[idx % len(colors_layer)])
44
45 fig = slab_model.visualize_3d(show_model_info=False,
46                               site_colors=color_site)
47
48 k_nodes = [[0, 0], [2 / 3, 1 / 3], [0.5, 0.5], [1 / 3, 2 / 3],
49 [0, 0], [0.5, 0.5]]
50 k_label = (r"\Gamma", r"K", r"M", r"K^\prime", r"\Gamma",
51             r"K", r"M")
52 fig, ax = slab_model.plot_bands(
53     nk=500, k_nodes=k_nodes, k_node_labels=k_label,
54     proj_orb_idx=[0], lw=1
55 )
56 fig.show()

```

Listing B.3: Validasi Edge State

```

1
2 from pythtb import TBModel, Lattice
3 import numpy as np
4 import matplotlib
5 matplotlib.use('TkAgg')
6 import matplotlib.pyplot as plt
7 from HamiltonianModel.hamiltonian import set_model
8 delta = 0.0
9 t = 1.0
10 soc_val = 0.1
11 rashba = 0.1
12 W = 0 * soc_val
13
14 # Matriks Pauli
15
16 sigma_z = np.array([0., 0., 0., 1.])
17 sigma_x = np.array([0., 1., 0., 0.])
18 sigma_y = np.array([0., 0., 1., 0.])
19
20 r3h = np.sqrt(3.0) / 2.0
21
22 sigma_a = 0.5 * sigma_x - r3h * sigma_y
23 sigma_b = 0.5 * sigma_x + r3h * sigma_y
24 sigma_c = -1.0 * sigma_x
25
26 my_model = set_model(t, soc_val, rashba, delta, W)
27 print(my_model)
28 my_model.info()
29
30 fin_model = my_model.make_finite(periodic_dirs=[1], num_cells
31     =[20])
32
33 k_nodes = [
34     [0.0, 0.0], # Gamma
35     [0.5, 0.0], # Mx
36     [0.5, 0.5], # Lx
37     [0.0, 0.5], # A
38     [0.0, 0.0] # Gamma
39 ]
40
41 k_labels = (r"\Gamma", r" M_x", r" L_x", r" A", r"\Gamma")
42 #fin_model.visualize_3d(draw_hoppings=True)

```

```

43 fig, ax = fin_model.plot_bands(
44     nk=500, k_nodes=k_nodes, k_node_labels=k_labels,
45     proj_orb_idx=[1]
46 )
47 plt.savefig('result/ribbon_band.pdf')
48 plt.show()

```

### B.3 Kode Peta Variasi Parameter

Berikut adalah kode yang kami gunakan untuk menunjukkan pengaruh variasi parameter lewat peta spektrum, peta probabilitas, dan peta kerapatan energi:

Listing B.4: Konstruksi Peta Spektrum

```

1
2 from pythtb import TBModel, Lattice
3 import numpy as np
4 import matplotlib
5 matplotlib.use('TkAgg')
6 import matplotlib.pyplot as plt
7 from HamiltonianModel.hamiltonian import set_model
8
9 delta = np.array([0.0, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0])
10 t = 1.0
11 soc_val = 0.25
12 rashba = np.array([0.0, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3])
13 W = 0 * soc_val
14
15 # Matriks Pauli
16 sigma_z = np.array([0., 0., 0., 1.])
17 sigma_x = np.array([0., 1., 0., 0.])
18 sigma_y = np.array([0., 0., 1., 0.])
19 r3h = np.sqrt(3.0) / 2.0
20 sigma_a = 0.5 * sigma_x - r3h * sigma_y
21 sigma_b = 0.5 * sigma_x + r3h * sigma_y
22 sigma_c = -1.0 * sigma_x
23
24
25 k_nodes = [[0, 0], [0.5, 0], [0.5, 0.5], [0, 0], [0, 0.5]]
26 k_labels = [
27     r"\bar{\Gamma}",
28     r"\bar{X}",
29     r"\bar{M}",
30     r"\bar{\Gamma}",

```

```

31     r"\bar{Y}\",
32 ]
33
34 fig, ax = plt.subplots(len(delta), len(rashba), figsize=(12,12)
35                         )
36 ax = np.atleast_2d(ax)
37
38 for a,i in enumerate(delta):
39     for b,j in enumerate(rashba):
40
41         my_model = set_model(t, soc_val, j, i, W)
42         fin_model = my_model.make_finite(periodic_dirs=[0],
43                                         num_cells=[20])
44
45         # buat figure sementara
46         fig_tmp, ax_tmp = fin_model.plot_bands(
47             nk=201,
48             k_nodes=k_nodes,
49             k_node_labels=k_labels,
50             lw=1
51         )
52
53         # ambil axes tunggal
54         if isinstance(ax_tmp, (list, tuple, np.ndarray)):
55             ax_tmp = np.asarray(ax_tmp).ravel()[0]
56
57         # copy semua garis
58         for line in ax_tmp.get_lines():
59             ax[a,b].plot(
60                 line.get_xdata(),
61                 line.get_ydata(),
62                 color=line.get_color(),
63                 lw=line.get_linewidth()
64             )
65
66             ax[a,b].set_title(f" ={i}, R={j}")
67             ax[a,b].set_xlim(ax_tmp.get_xlim())
68             ax[a,b].set_ylim(ax_tmp.get_ylim())
69
70 plt.close(fig_tmp)
71 plt.tight_layout()
72 plt.savefig("result/peta_ribbon.pdf")
73 plt.show()

```

Listing B.5: Konstruksi Peta Probabilitas Elektron Pada Struktur Pita

```

1  from pythtb import TBModel, Lattice
2  import numpy as np
3  import matplotlib
4  matplotlib.use('TkAgg')
5  import matplotlib.pyplot as plt
6  from HamiltonianModel.hamiltonian import set_model as sm
7
8
9  delta = np.array([0.0, 0.5, 1.0, 2.5, 3.0])
10 t = 1.0
11 soc_val = 0.25
12 rashba = np.array([0.0, 0.5, 1.0, 2.5, 3.0])
13
14 fig, ax = plt.subplots(5, 5, figsize=(12, 5))
15
16 k_nodes = [
17     [0.0, 0.0, 0.0],      # Gamma
18     [2./3., 1./3., 0.0], # K
19     [0.5, 0.5, 0.0],    # M
20     [1./3., 2./3., 0.0],# K'
21     [0.0, 0.0, 0.0],    # Gamma
22 ]
23 label_k = (r"\$\\Gamma\$", r"\$K\$", r"\$M\$", r"\$K'\\prime\$", r"\$\\Gamma\$")
24
25 for i, d in enumerate(delta):
26     for j, r in enumerate(rashba):
27         my_model = sm(t, soc_val, r, d, 0)
28
29         my_model.plot_bands(
30             k_nodes=k_nodes,
31             nk=201,
32             k_node_labels=label_k,
33             fig=fig,
34             ax=ax[i, j],
35             proj_orb_idx=[0],
36             proj_spin=True,
37             cmap='inferno',
38             cbar=True
39         )
40
41 for i in range(5):
42     for j in range(5):
43         ax[i, j].grid(True, alpha=0.3)

```

```

44
45     # Hanya baris terakhir yang punya label k
46     if i != 4:
47         ax[i, j].set_xticklabels([])
48         ax[i, j].set_xlabel("")
49
50     # Hanya kolom pertama yang punya label energi
51     if j != 0:
52         ax[i, j].set_yticklabels([])
53         ax[i, j].set_ylabel("")
54
55     # Judul kecil tiap panel
56     ax[i, j].set_title(
57         rf"\delta={delta[i]}, \lambda_R={rashba[j]}",
58         fontsize=8
59     )
60
61 # Label global
62 fig.text(0.5, 0.04, "k-path", ha='center', fontsize=12)
63 fig.text(0.04, 0.5, "Energy", va='center', rotation='vertical',
64           fontsize=12)
65
66 # Spasi antar subplot (lebih rapi dari tight_layout)
67 plt.subplots_adjust(
68     left=0.08,
69     right=0.98,
70     bottom=0.08,
71     top=0.95,
72     wspace=0.25,
73     hspace=0.35
74 )
75
76 plt.tight_layout()
77 plt.savefig('result/peta_bulk.pdf', dpi=600)
78 plt.show()

```

Listing B.6: Konstruksi Peta Kerapatan Energi

#### B.4 Kode Analisis Topologi

Berikut adalah kode yang kami gunakan untuk menganalisis sifat topologis grafena dalam pengaruh *stacking layer*:

Listing B.7: Analisis Evolusi Hybrid Wannier Center

```

1
2 from pythtb import WFArray, Mesh, Lattice, TBModel
3 import numpy as np
4 import matplotlib.pyplot as plt
5 from HamiltonianModel.hamiltonian import set_model as sm
6
7 t = 1.0
8 soc = 0.3
9 rashba = 0.25
10 delta = 1.0
11
12 model = sm(t, soc, rashba, delta, 0)
13
14 k_nodes = [
15     [0.0, 0.0, 0.0],      # Gamma
16     [2./3., 1./3., 0.0], # K
17     [0.5, 0.5, 0.0],    # M
18     [1./3., 2./3., 0.0],# K'
19     [0.0, 0.0, 0.0],    # Gamma
20 ]
21 label_k = (r"\Gamma", r"K", r"M", r"K'", r"\Gamma")
22
23 #model.plot_bands(k_nodes=k_nodes, nk=201, k_node_labels=
24 #                   =label_k, proj_orb_idx=[0] )
25
26 mesh = Mesh(["k", "k", "k"])
27 mesh.build_grid(shape=(41, 41, 41), gamma_centered=True)
28 print(mesh)
29
30 wf_array = WFArray(model.lattice, mesh, spinful=True)
31 wf_array.solve_model(model=model)
32
33 wan_cent = wf_array.berry_phase(
34     axis_idx=1, state_idx=[0,1], contin=True, berry_evals=
35     True
36 )
37 wan_cent /= 2 * np.pi
38
39 nky = wan_cent.shape[0]
40 ky = np.linspace(0, 1, nky)
41
42 flux = wf_array.berry_flux(plane=(0, 1), state_idx=[0,1],
43 non_abelian=False)

```

```

41 chern_kz = np.sum(flux, axis=(0,1)) / (2 * np.pi)
42 print(chern_kz)
43 #print(wan_cent)
44
45 for shift in range(-2, 3):
46     plt.plot(ky, wan_cent[:, 0] + float(shift), "k")
47     plt.plot(ky, wan_cent[:, 1] + float(shift), "k")
48
49 plt.savefig("result/hwf.pdf")
50 plt.show()

```

Listing B.8: Analisis Plot Fungsi Axion Angle

```

1
2 from pythtb import TBModel, Lattice
3 import matplotlib.pyplot as plt
4 import numpy as np
5 from HamiltonianModel.hamiltonian import set_model as sm
6
7 sigma_z = np.array([0., 0., 0., 1.], dtype=complex)
8 sigma_x = np.array([0., 1., 0., 0], dtype=complex)
9 sigma_y = np.array([0., 0., 1., 0], dtype=complex)
10
11 r3h = np.sqrt(3.0) / 2.0
12 sigma_a = 0.5 * sigma_x - r3h * sigma_y
13 sigma_b = 0.5 * sigma_x + r3h * sigma_y
14 sigma_c = -1.0 * sigma_x
15
16 lat = [[1, 0, 0], [0.5, np.sqrt(3.0)/2.0, 0.0], [0.0, 0.0,
17 1.0]]
18 orb = [[1./3., 1./3., 0.0], [2./3., 2./3., 0.0]]
19 lattice = Lattice(lat_vecs=lat, orb_vecs=orb, periodic_dirs
=...)
20
21 model = TBModel(lattice=lattice, spinful=True)
22
23 t = 1.0
24 soc = 1/4
25 m = 0.5
26 rashba = 0.05
27
28 model.set_onsite(
29     lambda beta: [0, m * np.sin(beta), m * np.sin(beta), m
      * np.sin(beta)], ind_i=0,
)

```

```

30 model.set_onsite(
31     lambda beta: [0, -m * np.sin(beta), -m * np.sin(beta),
32                   -m * np.sin(beta)], ind_i=1,
33     )
34
35 for lvec in ([-1, 0, 0], [0, -1, 0], [0, 0, -1]):
36     model.set_hop(t, 0, 1, lvec)
37
38 model.set_hop(lambda beta: 3 * t + m * np.cos(beta), 0, 1, [0,
39               0, 0], mode="set")
40
41 lvec_list = ([1, 0, 0], [0, 1, 0], [0, 0, 1], [-1, 1, 0], [0,
42               -1, 1], [1, 0, -1])
43 dir_list = ([0, 1, -1], [-1, 0, 1], [1, -1, 0], [1, 1, 0], [0,
44               1, 1], [1, 0, 1])
45
46 for j in range(6):
47     spin = np.array([0.0] + dir_list[j])
48     model.set_hop(1j * soc * spin, 0, 0, lvec_list[j])
49     model.set_hop(-1j * soc * spin, 1, 1, lvec_list[j])
50
51 model.set_hop(1.j * rashba * spin, 0, 1, [0, 0, 0], mode="add")
52 model.set_hop(1.j * rashba * spin, 0, 1, [-1, 0, 0], mode="add")
53 model.set_hop(1.j * rashba * spin, 0, 1, [0, -1, 0], mode="add")
54
55 print(model)
56
57 nks = 30, 30, 30
58 n_beta = 21
59 betas = np.linspace(0, 2 * np.pi, n_beta, endpoint=True)
60 param_periods = {"beta": 2 * np.pi}
61
62 print(f"Total number of points: {nks[0]*nks[1]*nks[2]*n_beta}")
63
64 betas, axion, c2 = model.axion_angle(
65     nks=nks,
66     param_periods=param_periods,
67     return_second_chern=True,
68     use_tensorflow=True,
69     diff_scheme="central",
70     diff_order=8,
71     beta=betas,
72

```

```

68 )
69
70 print(f"Second Chern number C2={c2}")
71
72 fig, ax = plt.subplots()
73
74 ax.set_xlabel(r"$\beta$", size=15)
75 ax.set_ylabel(r"$\theta$", size=15)
76
77 tick_positions = np.arange(0, 2 * np.pi + np.pi / 4, np.pi / 4)
78 tick_labels = [
79     r"$0$",
80     r"$\frac{\pi}{4}$",
81     r"$\frac{\pi}{2}$",
82     r"$\frac{3\pi}{4}$",
83     r"$\pi$",
84     r"$\frac{5\pi}{4}$",
85     r"$\frac{6\pi}{4}$",
86     r"$\frac{7\pi}{4}$",
87     r"$2\pi$",
88 ]
89
90 # Set the ticks and labels for both axes
91 ax.set_xticks(tick_positions)
92 ax.set_xticklabels(tick_labels)
93 ax.set_yticks(tick_positions)
94 ax.set_yticklabels(tick_labels)
95
96 ## Riemann sum
97 ax.plot(betas, axion, lw=1, zorder=2, c="k")
98 ax.scatter(betas, axion, s=6, zorder=2, c="r")
99
100 ax.grid()
101 ax.set_title("Axion angle vs adiabatic parameter", size=12)
102 plt.savefig("result/axion_angle.pdf")
103 plt.show()

```