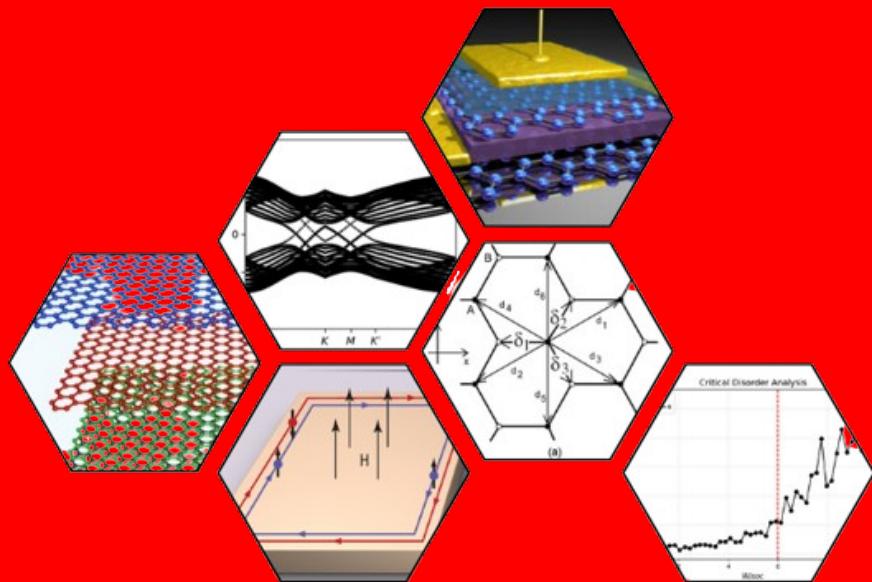


**STUDI PENGARUH STACKING LAYER DAN VARIASI PARAMETER PADA
MODEL GRAFENA KANE-MELE**



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

I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Teori	2
I.2.1 Efek Topologis	2
I.2.2 Model Topologis Grafena	5
I.2.3 Anderson Disorder	8
I.3 Tujuan Penelitian	9
I.4 Manfaat Penelitian	9
II MODEL DAN METODE PENELITIAN	10
II.1 Model Fisik Sistem	10
II.1.1 Tight Binding Model Grafena	10
II.1.2 Kane-Mele <i>Spin Orbit Coupling</i>	11
II.1.3 <i>Stacking Layer</i>	11
II.2 Formulasi dan Validasi Numerik	12
II.2.1 Diskretisasi Ruang	12
II.2.2 Validasi Efek Tepi	13
II.3 Metode Analisis Spektrum	13
II.3.1 Peta Spektrum Ribbon	13
II.3.2 Peta Probabilitas Elektron	14
II.3.3 Peta Kerapatan Energi	14
II.4 Metode Analisis Topologi	15
II.4.1 <i>Hybrid Wannier Function</i>	15
II.4.2 <i>Axion Angle</i>	15
II.5 Parameter dan Implementasi	15
II.5.1 Tabel Parameter	15
II.5.2 Ekstensi Numerik	15
II.6 Diagram Alur Penelitian	15

III HASIL	16
III.1 Batas kekuatan Disorder	16
III.1.1 Validasi Topologis pada Sistem Bersih	16
III.1.2 Transisi Topologis: Plot DoS pada Energi Nol	17
III.2 Kerusakan Dispersi Energi dan Hilangnya Edge State Helical	18
III.3 Peta Spektrum	19
IV KESIMPULAN	21
IV.1 Kesimpulan	21
IV.2 Saran	21
A Derivasi Matematis	22
A.1 Tight Binding Model	22
B Lampiran Kode Program	24
B.1 Kode Utama Simulasi(Model Kane-Mele 3D)	24
B.2 Kode Tambahan: Analisis Data	25

DAFTAR GAMBAR

I.1	Skema konduktansi tepi pada pelat metal. Gambar diadaptasi dari https://universe-review.ca/F13-atom06d.htm##f08w	3
I.2	Hasil pengukuran resistansi quantum hall effect. Gambar diadaptasi dari D.R. Leadley, Warwick University (1997).	3
I.3	<i>Berry curvature</i> pada BZ (a)chern number=-0,(b)chern number=0 (c)chern number=1. Gambar diadaptasi dari (Vanderbilt2018).	4
I.4	Struktur pita grafena yang menunjukkan kerucut dirac pada titik K dan K'. Gambar diadaptasi dari https://www.graphenea.com/blogs/graphene-news/6969324-a-bandgap-semiconductor-nanostructure-made-entirely-from-graphene	
I.5	Skema <i>Second Neighbour Hoping</i> . Gambar diadaptasi dari https://nbviewer.org/github/topocm/topocm_content/blob/edx_2015/w4_haldane/haldane_model.ipynb	7
I.6	Caption	7
II.1	Visualisasi skema stacking layer	12
III.1	(a) Mode Trivial sistem($SOC=0.06$) (b) Mode Non-Trivial sistem($SOC=0.24$)	16
III.2	Evolusi <i>Hybrid Wannier Function</i>	17
III.3	Plot DoS pada $E = 0$ terhadap kekuatan disorder W/λ_{SO}	18
III.4	Struktur pita energi pada $W = 6.0\lambda_{SO}$. Tidak tampak lagi lintasan edge state yang menyambung pita valensi dan pita konduksi.	19
III.5	Peta Spektrum sistem pada bidang parameter disorder. Daerah putih menandakan struktur spektrum topologis, sedangkan daerah gelap merupakan spektrum trivial.	20

DAFTAR TABEL

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(**Chang2015**), 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. Di sinilah fisika material bertemu dengan keanggunan matematika topologi, menciptakan simfoni sains yang berpotensi merevolusi komputasi kuantum hingga teknologi energi bersih(**Nadeem2021**).

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 (**PhysRev.71.622**)**(PhysRevB.1.4747)**. 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 di diatur untuk sedimikian untuk mendukung terealisasinya proteksi topologi, hasilnya menunjukkan bahwa dispersi pita terjadi pada Dirac cone dan menciptakan fenomena konduktansi hall yang terkuantisasi (**PhysRevLett.61.2015**). 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 ($\sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{\hbar}$) yang artinya pada regim kuantum detail material tidaklah menjadi penentu sifat elektronik melainkan hanya ditentukan oleh sifat topologis sistemnya(**PhysRevLett.45.494**). 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 (**PhysRevLett.49.405**).

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 sistem (**PhysRevLett.95.226801**) (**PhysRevLett.95.146802**) (**PhysRevLett.98.106803**).

Secara eksperimental, Disorder memainkan peran penting pada properti elektronik sistem, hal ini didasarkan oleh kecacatan sampel yang tidak terhindarkan. Berbeda dengan isolator atau konduktor biasa, properti trivial Topological Insulators juga menyebabkan respon sistem terhadap disorder berbeda (**Wu'2016**). Oleh karena itu, studi tentang efek lokalisasi disorder pada Topological Insulators sangatlah penting dalam upaya pengaplikasian material ini menuju industri teknologi kontemporer.

Realisasi eksperimental hingga industrial dari topik teoritis seperti *Helical edge state material* menjadi tantangan yang dihadapi pada penelitian fisika kondensat kontemporer. Kecacatan pada material nyata pun tak dapat dihindarkan, oleh karena itu penelitian ini bertujuan untuk meninjau dampak dari kecacatan pada grafena yang mengalami gangguan potensial ataupun *defect* pada kisi hingga pengaruh penyusunan lapisan grafena.

I.2 Teori

I.2.1 Efek Topologis

Quantum Hall Conductance

Quantum Hall Conductance adalah versi terkuantisasi dari efek Hall klasik, efek ini ditinjau dari pelat semikonduktor 2 Dimensi dengan temperatur rendah dan medan magnetik tegak lurus yang kuat(lihat gambar I.6). Secara klasik resistivitas longitudinal diharapkan akan berbanding linear dengan medan flux magnetik. Namun, eksperimen yang dilakukan menunjukkan bahwa resistansi terkuantisasi dan menunjukkan adanya step-step(lihat gambar I.2). Dimana nilai resistansi longitudinalnya adalah $R_{xy} = \frac{V_{hall}}{I_{channel}} = \frac{h}{e^2 v}$, dimana v adalah nilai integer(1,2,3,4,...). Step-step ini mengindikasikan fenomena Topologis(**PhysRevLett.45.494**).

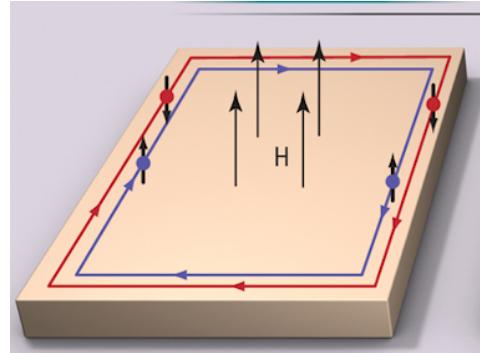


Figure I.1: Skema konduktansi tepi pada pelat metal. Gambar diadaptasi dari <https://universe-review.ca/F13-atom06d.htm#f08w>

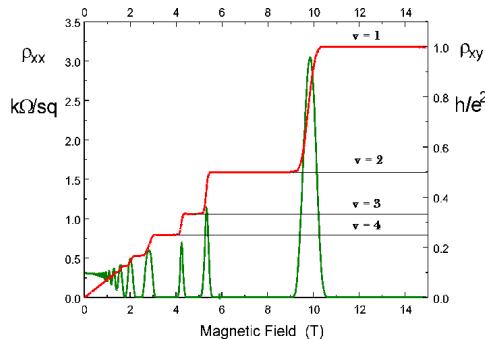


Figure I.2: Hasil pengukuran resistansi quantum hall effect. Gambar diadaptasi dari D.R. Leadley, Warwick University (1997).

Chern Number

Chern number (C) merupakan invarian topologis yang mengkuantifikasi sifat geometrik fungsi gelombang elektron dalam ruang momentum. Konsep ini pertama kali dijelaskan dalam konteks *Quantum Hall Effect* (QHE) oleh Thouless, Kohmoto, Nightingale, dan den Nijs (TKNN) (**PhysRevLett.49.405**). Secara matematis, Chern number didefinisikan sebagai integral dari *Berry curvature* ($\Omega(\mathbf{k})$) di seluruh *Brillouin zone* (BZ):

$$C = \frac{1}{2\pi} \iint_{\text{BZ}} \Omega(\mathbf{k}) dk_x dk_y, \quad (\text{I.1})$$

di mana $\Omega(\mathbf{k})$ merupakan curl dari *Berry connection* $\mathcal{A}(\mathbf{k})$:

$$\Omega(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A}(\mathbf{k}), \quad (\text{I.2})$$

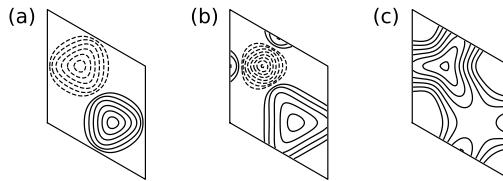


Figure I.3: *Berry curvature* pada BZ (a)chern number=-0,(b)chern number=0 (c)chern number=1. Gambar diadaptasi dari ([Vanderbilt2018](#)).

dengan $\mathcal{A}(\mathbf{k})$ diberikan oleh:

$$\mathcal{A}(\mathbf{k}) = -i\langle u_{\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{\mathbf{k}} \rangle. \quad (\text{I.3})$$

Pada persamaan di atas, $|u_{\mathbf{k}}\rangle$ adalah fungsi gelombang Bloch periodik untuk pita energi terisi, dan integral dilakukan pada ruang momentum dua dimensi (BZ).

Peran Chern Number dalam Efek Hall Kuantum

Dalam konteks QHE, Chern number terkait langsung dengan konduktansi Hall terkuantisasi ([PhysRevLett.61.2015](#)):

$$\sigma_{xy} = C \cdot \frac{e^2}{h}, \quad (\text{I.4})$$

di mana C bernilai bilangan bulat (integer). Kuantisasi ini bersifat *topologis*, artinya tidak bergantung pada gangguan lokal atau detail material selama simetri topologi sistem terjaga.

Aplikasi pada Model Haldane dan Kane-Mele

Pada model Haldane ([PhysRevLett.61.2015](#)), Chern number muncul akibat patahnya simetri waktu-balik (*time-reversal symmetry*) oleh medan magnet periodik. Untuk grafena dengan modifikasi Haldane, nilai $C = \pm 1$ menandai fase topologi non-trivial yang mendukung keadaan tepi (*edge states*) terkuantisasi.

Sementara itu, model Kane-Mele ([PhysRevLett.95.226801](#)) memperkenalkan generalisasi Chern number ke invarian \mathbb{Z}_2 akibat keberadaan spin-orbit coupling. Meskipun demikian, konsep Chern number tetap relevan untuk sistem dengan simetri spin-terpisah (*spin Chern number*).

I.2.2 Model Topologis Grafena

Struktur Dasar Grafena

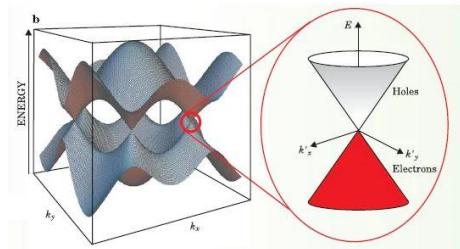


Figure I.4: Struktur pita grafena yang menunjukkan kerucut dirac pada titik K dan K'. Gambar diadaptasi dari <https://www.graphenea.com/blogs/graphene-news/6969324-a-bandgap-semiconductor-nanostructure-made-entirely-from-graphene>

Paper seminal (**PhysRev.71.622**) merumuskan model *tight-binding* pertama untuk grafena melalui Hamiltonian:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger b_j + \text{h.c.}) \quad (\text{I.5})$$

dengan $t \approx 2.8$ eV merupakan integral *hopping* antar situs karbon terdekat, dan a_i^\dagger (b_j) operator kreasi (anihilasi) pada sub-lattice A (B).

Formulasi Hamiltonian Dirac

(**Semenoff1984**) melakukan ekspansi $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ di sekitar titik Dirac (K , K'), menghasilkan Hamiltonian efektif:

$$H = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \quad (\text{I.6})$$

dengan:

- $v_F \approx 10^6$ m/s: kecepatan Fermi
- $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$: matriks Pauli merepresentasikan *pseudospin*
- \mathbf{k} : vektor momentum relatif terhadap titik Dirac

Persamaan (I.6) menunjukkan ekivalensi formal dengan Hamiltonian Dirac (2+1)D untuk fermion tanpa massa, di mana v_F menggantikan c .

Sifat Topologis

(**CastroNeto2009**) mengidentifikasi konsekuensi topologis dari Hamiltonian (I.6):

$$\text{Indeks Chern } \mathcal{C} = \pm 1 \quad \text{per kerucut Dirac} \quad (\text{I.7})$$

$$\text{Keadaan Tepi } \psi_{\text{edge}} \propto e^{ik_x x} e^{-|y|/\xi} \quad (\text{I.8})$$

$$\text{Anomali Hall } \sigma_{xy} = \pm 4 \frac{e^2}{h} \quad (N = 0) \quad (\text{I.9})$$

Transport Elektronik

Relasi dispersi linear $E(\mathbf{k}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{k}|$ menghasilkan:

$$\rho(E) = \frac{2|E|}{\pi(\hbar v_F)^2} \quad (\text{kerapatan keadaan}) \quad (\text{I.10})$$

dengan mobilitas elektron:

$$\mu = \frac{ev_F^2 \tau}{E_F} \quad (\tau : \text{waktu relaksasi}) \quad (\text{I.11})$$

Model Haldane

Haldane pada papernya (**PhysRevLett.61.2015**) membuktikan bahwa fenomena quantum hall effect bisa terjadi tanpa adanya medan magnet eksternal. Haldane memperkenalkan hoping tetangga kedua untuk menciptakan efek psudomagnet yang memecah time reversal symmetry(yang merupakan syarat dari fenomena Quantum Hall Effect) dan modulasi potensial untuk membuka celah energi.

Arah panah pada gambar I.6 mengindikasikan nilai hoping antara $+it_2$ dan $-it_2$ pada arah yang berlawanan. Perilaku ini menyebabkan perusakan simetri waktu pada sistem dengan bentuk hamiltonian:

$$H(k) = H_0(k) + M\sigma + 2t_2 \sum_i \sigma_z \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_i). \quad (\text{I.12})$$

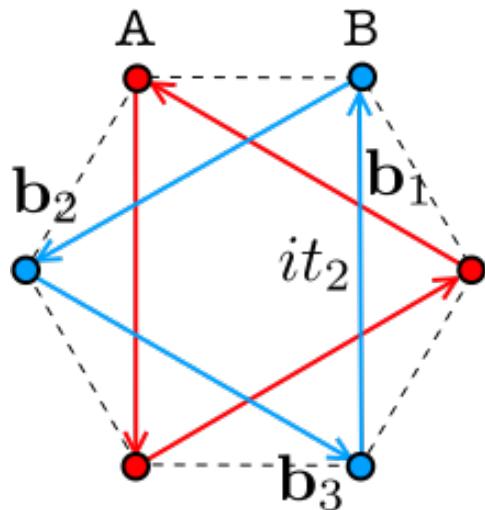


Figure I.5: Skema Second Neighbour Hoping. Gambar diadaptasi dari https://nbviewer.org/github/topocm/topocm_content/blob/edx_2015/w4_haldane/haldane_model.ipynb

Quantum Spin Hall

Seperti yang telah kita ketahui pada bagian I.2.1, terjadi kuantisasi konduktansi yang disebabkan oleh pembentukan *Landau Level* dalam medan magnet eksternal. Namun, *Quantum spin hall effect* menunjukkan bahwa kuantisasi konduktansi bisa diperoleh tanpa medan magnetik eksternal, melalui kopling intrinsik spin yang ditunjukkan oleh (**PhysRevLett.95.226801**)

$$H_{\text{KM}} = H_t + H_{\lambda_{SO}} + H_R \quad (\text{I.13})$$

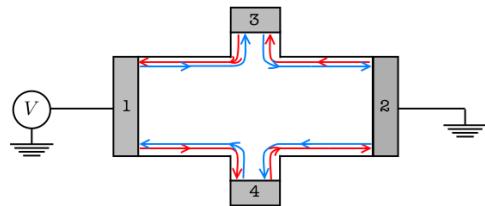


Figure I.6: Caption

dengan:

$$H_t = t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \quad (\text{Hopping terdekat}) \quad (\text{I.14})$$

$$H_{\lambda_{SO}} = i\lambda_{SO} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle \alpha\beta} \nu_{ij} c_{i\alpha}^\dagger s_{\alpha\beta}^z c_{j\beta} \quad (\text{SOC intrinsik}) \quad (\text{I.15})$$

$$H_R = \lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle \alpha\beta} c_{i\alpha}^\dagger (\mathbf{s}_{\alpha\beta} \times \hat{\mathbf{d}}_{ij})_z c_{j\beta} \quad (\text{Rashba SOC}) \quad (\text{I.16})$$

di mana:

- $\nu_{ij} = \frac{2}{\sqrt{3}} (\hat{\mathbf{d}}_1 \times \hat{\mathbf{d}}_2)_z = \pm 1$ (fase chiral next-nearest-neighbor)
- \mathbf{s} = matriks Pauli untuk spin elektron
- $\hat{\mathbf{d}}_{ij}$ = vektor satuan antara situs i dan j

Berbeda dengan karakterisasi topologis pada QHE yang ditentukan oleh *Chern Number*, QSHE dalam model kane-mele memiliki $Z_2 = 1$ yang menjamin keberadaan konduktansi tepi yang dilindungi oleh *TRS*(*Time Reversal Symmetry*). Invarian \mathbb{Z}_2 didefinisikan melalui integral curvature Berry di setengah BZ (**PhysRevLett.95.146802**):

$$\mathbb{Z}_2 = \frac{1}{2\pi} \left[\oint_{1/2 \text{ BZ}} \mathcal{F}(\mathbf{k}) d^2k - \oint_{\partial(1/2 \text{ BZ})} \mathcal{A}(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} \right] \mod 2 \quad (\text{I.17})$$

dengan:

$$\mathcal{F} = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A} \quad (\text{Curvature Berry}) \quad (\text{I.18})$$

$$\mathcal{A} = -i \sum_{n \in \text{occ}} u_{n\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} \quad (\text{Koneksi Berry}) \quad (\text{I.19})$$

I.2.3 Anderson Disorder

(**PhysRev.109.1492**) menunjukkan adanya fenomena lokalisasi elektron dalam potensial acak yang menyebabkan transisi logam-isolator, di mana fungsi gelombang elektron berubah dari keadaan *extended* menjadi *localized*. Mekanisme ini dapat dimodelkan melalui Hamiltonian:

$$H = \sum_i \epsilon_i ii + t \sum_{\langle i,j \rangle} (ij + \text{h.c.}) \quad (\text{I.20})$$

dengan $\epsilon_i \in [-W/2, W/2]$ adalah potensial on-site acak dan t adalah integral hopping.

Dampak pada Sistem Topologi

Dalam sistem Quantum Spin Hall (QSH), disorder memengaruhi stabilitas fase topologi melalui:

- **Hybridisasi Edge-Bulk:** Disorder kuat menyebabkan edge states helical berhibridisasi dengan keadaan bulk terlokalisasi.

I.3 Tujuan Penelitian

1. Memperoleh respon spektrum energi *Quantum Spin Hall* (QSH) kane-Mele 3D terhadap variasi disorder.
2. Memperoleh Perubahan struktur pita energi sebagai respons terhadap disorder dalam model Kane-Mele 3D.
3. Memperoleh peta spektrum untuk memvisualisasikan stabilitas *Quantum Spin Hall* terhadap disorder.

I.4 Manfaat Penelitian

1. Memberikan wawasan teoritis terhadap efek *stacking* lapisan dalam memperluas model Kane-Mele ke dimensi tiga.
2. Menyediakan Batas gangguan struktural (ketidakteraturan potensial, hopping, dan massa efektif) yang memengaruhi kestabilan fase topologis dalam sistem 3D.
3. Memberikan pemahaman lebih dalam mengenai bagaimana disorder memengaruhi keberlangsungan simetri pembalikan waktu (*time-reversal symmetry*) pada sistem topologis.
4. Mendukung pengembangan *dissipationless electronics* berbasis *edge states helical* untuk perangkat elektronik modern.

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 **PhysRevLett.95.226801** dan **PhysRevB.91.085106**, 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 terlokalasi, 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 **GROSSO20141**:

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

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 **CastroNeto2009**, 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 **PhysRevLett.95.226801** 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 Haldane **PhysRevLett.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 **PhysRevLett.95.226801**, mengikuti pendekatan peneleitian berikut **PhysRevB.91.085106**. Hamiltonian total terdiri dari suku Kane-Mele intralayer, hopping antarlapisan, dan kopling spin-orbit (SOC) antarlapisan:

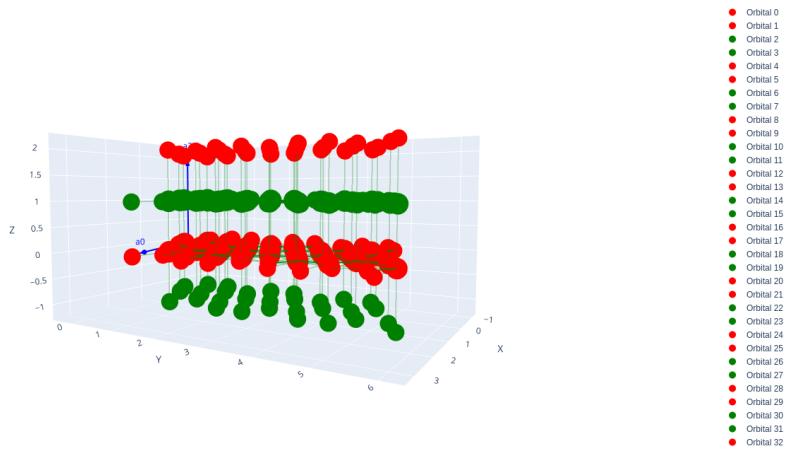


Figure II.1: Visualisasi skema stacking layer

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

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

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

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 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.

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*.

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.

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 **PhysRevLett.95.226801**, 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 tervisualisasikan 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.

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;

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

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 ΔE , hasil diagonalisasi hamiltonian kemudian akan menentukan berapa banyak level energi E_n yang masuk kedalam setiap bin, yang kemudian akan dibagi dengan ΔE untuk memperoleh kerapatan energi.

II.4 Metode Analisis Topologi

II.4.1 *Hybrid Wannier Function*

II.4.2 *Axion Angle*

II.5 Parameter dan Implementasi

II.5.1 Tabel Parameter

II.5.2 Ekstensi Numerik

II.6 Diagram Alur Penelitian

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

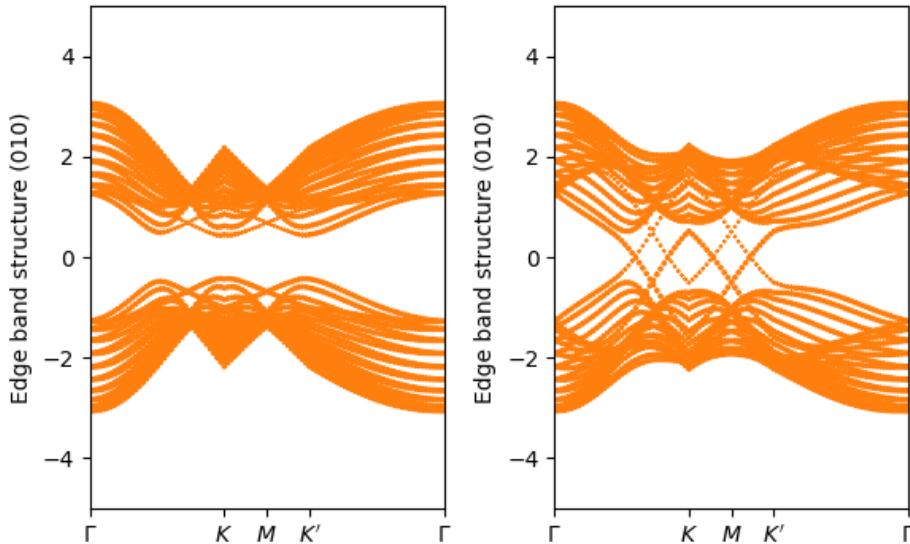


Figure III.1: (a) Mode Trivial sistem(SOC=0.06) (b) Mode Non-Trivial sistem(SOC=0.24)

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 (**PhysRevB.91.085106**). 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

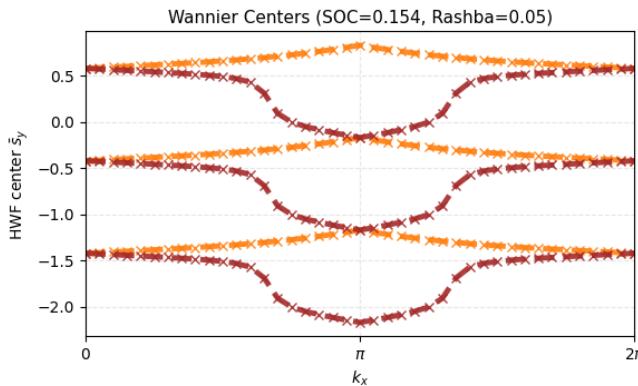


Figure III.2: Evolusi *Hybrid Wannier Function*

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(**PhysRevB.83.035108**) 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.

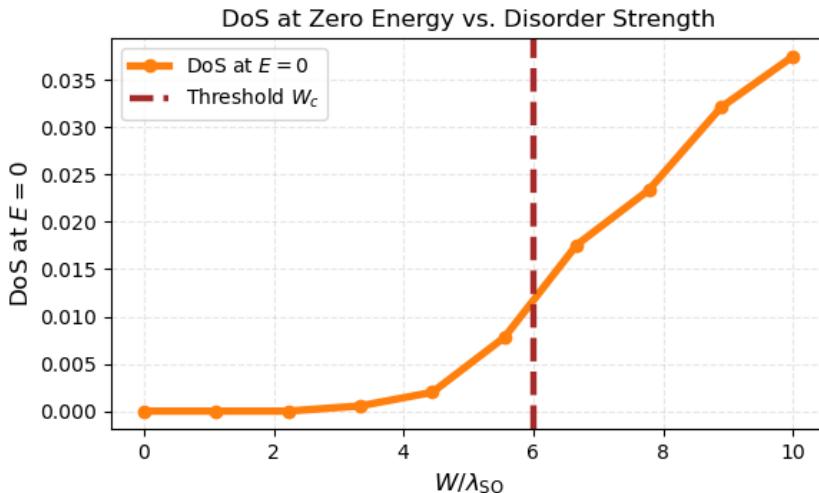


Figure III.3: Plot DoS pada $E = 0$ terhadap kekuatan disorder W/λ_{SO} .

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*.

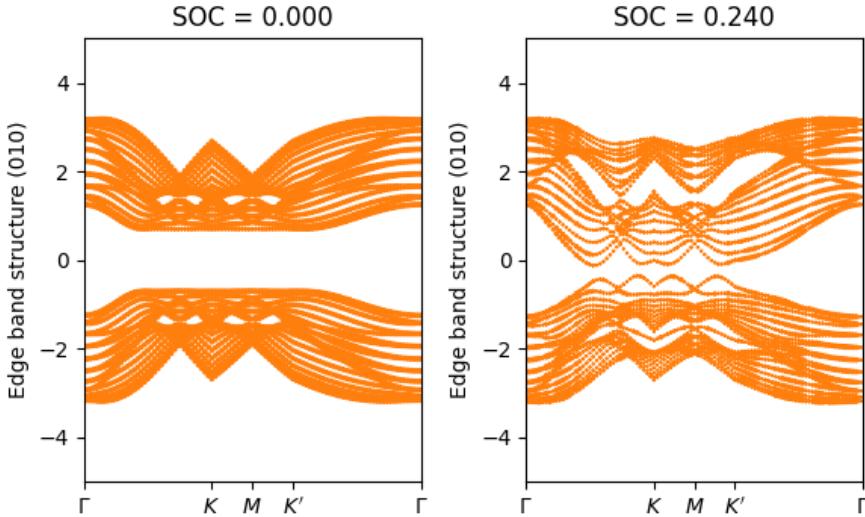


Figure III.4: Struktur pita energi pada $W = 6.0\lambda_{SO}$. Tidak tampak lagi lintasan edge state yang menyambung pita valensi dan pita konduksi.

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.

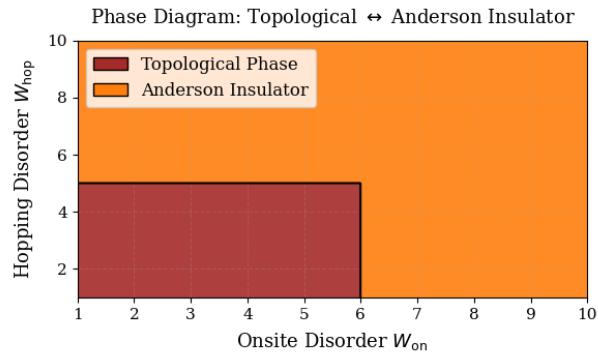


Figure III.5: Peta Spektrum sistem pada bidang parameter disorder. Daerah putih menandakan struktur spektrum topologis, sedangkan daerah gelap merupakan spektrum trivial.

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.

BAB A

Derivasi Matematis

A.1 Tight Binding Model

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 mengsubtitusi $R_p = r_j - R_l$

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

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

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

Normalisasi Fungsi Gelombang:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Maka *first order correction* dari energi:

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

$$\psi_k^*(r) H \psi_k = \frac{1}{N} \sum_n e^{-ik.\rho(n)} \int \phi^*(r - \rho_n) H \phi(r) dr \quad (\rho_n = r_m - r_j) \quad (\text{A.19})$$

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:

Listing B.1: Model Stacking Graphene

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 from pythtb import tb_model
4
5 # Konstanta dan parameter
6 delta = 0.7
7 t = -1.0
8 soc_list = np.array([-0.054, -0.24])
9 rashba = 0.05
10 width = 10
11 nkr = 101
12 W = 15*soc_list
13 n_avg = 10 # jumlah sample untuk averaging
14
15 sigma_z = np.array([0., 0., 0., 1.])
16 sigma_x = np.array([0., 1., 0., 0.])
17 sigma_y = np.array([0., 0., 1., 0.])
18 r3h = np.sqrt(3.0) / 2.0
19 sigma_a = 0.5 * sigma_x - r3h * sigma_y
20 sigma_b = 0.5 * sigma_x + r3h * sigma_y
21 sigma_c = -1.0 * sigma_x
22
23 def set_model(t, soc, rashba, delta, W):
24     lat = [[1, 0, 0], [0.5, np.sqrt(3.0)/2.0, 0.0], [0.0, 0.0,
25             1.0]]
26     orb = [[1./3., 1./3., 0.0], [2./3., 2./3., 0.0]]
27     model = tb_model(3, 3, lat, orb, nspin=2)
28
29     disorder_values = np.random.uniform(-W/2, W/2, size=len(orb
30             ))
31     onsite_energies = [delta + disorder_values[i] if i % 2 == 0
32             else -delta + disorder_values[i] for i in range(len(
33             orb))]
34     model.set_onsite(onsite_energies)
```

```

31
32     for lvec in ([0, 0, 0], [-1, 0, 0], [0, -1, 0]):
33         model.set_hop(t, 0, 1, lvec)
34     for lvec in ([1, 0, 0], [-1, 1, 0], [0, -1, 0]):
35         model.set_hop(soc * 1.j * sigma_z, 0, 0, lvec)
36     for lvec in([-1, 0, 0], [1, -1, 0], [0, 1, 0]):
37         model.set_hop(soc * 1.j * sigma_z, 1, 1, lvec)
38     model.set_hop(0.3 * soc * 1j * sigma_z, 1, 1, [0, 0, 1])
39     model.set_hop(-0.3 * soc * 1j * sigma_z, 0, 0, [0, 0, 1])
40     model.set_hop(1.j * rashba * sigma_a, 0, 1, [0, 0, 0], mode
41                   ="add")
42     model.set_hop(1.j * rashba * sigma_b, 0, 1, [-1, 0, 0],
43                   mode="add")
44     model.set_hop(1.j * rashba * sigma_c, 0, 1, [0, -1, 0],
45                   mode="add")

46
47     return model

```

B.2 Kode Tambahan: Analisis Data

Syntax tambahan untuk menganalisis hasil simulasi:

Listing B.2: Kode Analisis DOS

```

1
2 dos_at_zero = []
3
4 for W in W_values:
5     all_eigenvalues = []
6     for _ in range(n_samples):
7         # Bangun model dengan disorder W
8         my_model = set_model(t, soc, rashba, delta, W)
9
10        # Potong model menjadi ribbon
11        ribbon_model = my_model.cut_piece(width, fin_dir=1,
12                                         glue_edgs=False)
13
14        # Hitung eigenenergi
15        (k_vec, k_dist, k_node) = ribbon_model.k_path(
16            [[0.,0.], [2./3.,1./3.], [.5,.5], [1./3.,2./3.],
17             [0.,0.]],
18            nkr, report=False
19        )
20        rib_eval = ribbon_model.solve_all(k_vec)

```

```

19     all_eigenvalues.append(rib_eval.flatten())
20
21 # Gabungkan semua eigenenergi
22 combined_eval = np.concatenate(all_eigenvalues)
23
24 # Hitung histogram dan ekstrak DOS pada E=0
25 hist, bin_edges = np.histogram(combined_eval, bins=50,
26                               range=(-4., 4.), density=True)
27 bin_centers = 0.5 * (bin_edges[1:] + bin_edges[:-1])
28 idx_zero = np.argmin(np.abs(bin_centers)) # Indeks bin
29         terdekat E=0
30 dos_at_zero.append(hist[idx_zero])
31
32 # Menyimpan data ke dalam file CSV
33 with open('dos_at_zero.csv', mode='w', newline='') as file:
34     writer = csv.writer(file)
35     writer.writerow(["W/soc", "DOS\u2225at\u2225E=0"]) # Menulis header
36     for W, dos in zip(W_values / soc, dos_at_zero):
37         writer.writerow([W, dos]) # Menulis setiap baris data
38
39 # Plot hasil
40 #z2 =ribbon_model.z2_invariant()
41 #print(f"Z2 invariant: {z2}")
42 plt.plot(W_values/soc, dos_at_zero, 'o-', label='Simulasi')
43 plt.axvline(x=2.5, c='r', ls='--', label='Prediksi\u2225W_c=2.5\
44         lambda_{S0}$')
45 plt.xlabel("$W/\lambda_{S0}$")
46 plt.ylabel("DOS\u2225pada\u2225E=0$")
47 plt.legend()
48 plt.show()

```

Listing B.3: Kode Analisis Pita Energi

```
1
2 fig, ax = plt.subplots(1, 2, figsize=(10, 4))
3
4 for je, soc_val in enumerate(soc_list):
5     eval_total = None
6     for _ in range(n_avg):
7         my_model = set_model(t, soc_val, rashba, delta, W)
8         ribbon_model = my_model.cut_piece(width, fin_dir=1,
9             glue_edgs=False)
10        path =
11            [[0.,0.],[2./3.,1./3.],[.5,.5],[1./3.,2./3.],[0.,0.]]
```

```

10     (k_vec, k_dist, k_node) = ribbon_model.k_path(path, nkr
11         , report=False)
12     rib_eval = ribbon_model.solve_all(k_vec, eig_vectors=
13         False)
14
15     if eval_total is None:
16         eval_total = np.array(rib_eval)
17     else:
18         eval_total += np.array(rib_eval)
19
20     rib_eval_avg = eval_total / n_avg
21     nbands = rib_eval_avg.shape[0]
22     ax1 = ax[je]
23     ax1.set_xlim([0, k_node[-1]])
24     ax1.set_xticks(k_node)
25     ax1.set_xticklabels([r'$\Gamma$', r'$K$', r'$M$', r"$K''$",
26         r'$\Gamma$'])
27     ax1.set_ylim(-5, 5)
28     ax1.set_ylabel("Averaged Band Structure (010)")
29     ax1.set_title(f"SOC={soc_val:.3f}")
30
31     for i in range(len(k_vec)):
32         ax1.scatter([k_dist[i]] * nbands, rib_eval_avg[:, i], s
33             =2, c='black', alpha=0.5)
34
35 plt.tight_layout()
36 plt.savefig("averaged_band_structure.pdf")
37 plt.show()

```

Listing B.4: Kode Diagram Fasa

```

1
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 import numpy as np
4
5 # Define phase boundary values
6 Wc_onsite = 6.0 # threshold for onsite disorder
7 Wc_hopping = 5.0 # threshold for hopping disorder
8
9 # Create grid
10 x = np.linspace(1, 10, 100) # Onsite disorder
11 y = np.linspace(1, 10, 100) # Hopping disorder
12 X, Y = np.meshgrid(x, y)
13

```

```

14 # Define trivial phase condition: either x > Wc_onsite or y >
   Wc_hopping
15 Z = np.zeros_like(X)
16 Z[(X > Wc_onsite) | (Y > Wc_hopping)] = 1 # Anderson
   Insulators
17 Z[(X <= Wc_onsite) & (Y <= Wc_hopping)] = 0 # Topological
   phase
18
19 # Plot the phase diagram
20 fig, ax = plt.subplots(figsize=(6, 5))
21 c = ax.contourf(X, Y, Z, levels=[-0.1, 0.5, 1.1], colors=['red',
   'black'], alpha=0.8)
22 ax.contour(X, Y, Z, levels=[0.5], colors='k', linewidths=1)
23
24 # Annotations and labels
25 ax.set_xlabel("Onsite_Disorder_W(x)")
26 ax.set_ylabel("Hopping_Disorder_W(y)")
27 ax.set_title("Phase_Diagram: Topological_vs_Anderson_Insulators")
28
29 # Color legend
30 from matplotlib.patches import Patch
31 legend_elements = [Patch(facecolor='red', label='Topological',
   Phase'),
   Patch(facecolor='black', label='Anderson',
   Insulator_Phase')]
32 ax.legend(handles=legend_elements, loc='upper_left')
33
34 plt.tight_layout()
35 plt.show()
36

```

Listing B.5: Data DOS at E=0 terhadap kekuatan disorder (W/soc)

```

1 W/soc,DOS at E=0
2 0.0,0.0
3 1.111111111111112,0.0
4 2.222222222222223,0.0
5 3.333333333333335,0.0005538366336633659
6 4.444444444444445,0.0019863861386138597
7 5.555555555555555,0.00779702970297029
8 6.666666666666667,0.017558787128712856
9 7.777777777777779,0.023363242574257405
10 8.88888888888889,0.03208796943121178
11 10.0,0.03748905795087555

```