

**KALKULASI NILAI EIGEN BERBASIS MATRIKS HAMILTONIAN
MENGUNAKAN TEKNIK *BLOCK MATRIX* STUDI KASUS PADA
*GRAPHENE***

SKRIPSI

Diajukan sebagai Salah Satu Syarat untuk Menempuh Ujian Akhir Tingkat Sarjana
pada Program Studi Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Padjadjaran

Oleh:
Mirza Aditya Deliantama
140310170044



**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA & ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS PADJAJARAN
2021**

LEMBAR PENGESAHAN

JUDUL : KALKULASI NILAI EIGEN BERBASIS MATRIKS
HAMILTONIAN MENGGUNAKAN TEKNIK *BLOCK*
MATRIX : STUDI KASUS PADA *GRAPHENE*
PENYUSUN : MIRZA ADITYA DELIANTAMA
NPM : 140310170044
LAB : FISIKA INSTRUMENTASI

Jatinangor, Juli 2021

Menyetujui,

Pembimbing Utama

Pembimbing Pendamping

Prof. Dr. I Made Joni, M.Sc.

NIP. 19720601 200112 1 001

Dr. Ferry Faizal, Ph.D.

NIP. 19820531 201903 3 001

Mengetahui,

Ketua Program Studi Fisika

Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Universitas Padjadjaran

Dr. Andri Abdurrochman, S.Si, MT.

NIP. 19740526 200312 1 002

KATA PENGANTAR

Dengan nama Allah yang Maha Pengasih dan Maha Penyayang. Alhamdulillahahirabbil'aalamiin, segala puji hanya milik Allah 'azza wa jalla karena berkat-Nya lah skripsi yang berjudul "Kalkulasi nilai eigen berbasis matriks Hamiltonian menggunakan Teknik *Block Matrix* : studi kasus pada *Graphene Oxide*" sebagai salah satu syarat menyelesaikan pendidikan tingkat sarjana pada Program Studi Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Padjadjaran dapat selesai. Tak lupa terimakasih kepada Drs. Enung Achmad S., M.Pd., dan Lilis Susilayati, S.H., yaitu orang tua penulis yang selalu memberi dukungan kepada penulis sehingga penulis dapat menyelesaikan dengan sebaik mungkin. Penulis juga mengucapkan terimakasih kepada pihak-pihak yang membantu penulis untuk menyelesaikan tugas akhir ini:

1. Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Padjadjaran, Prof. Dr. Iman Rahayu, M.Sc.
2. Kepala Departemen Fisika FMIPA Unpad, Prof. Dr. Camellia Panatarani
3. Ketua Program Studi Fisika FMIPA Unpad, Dr. Andri Abdurrochman, S.Si, MT.
4. Prof. Dr. Eng. I Made Joni, M.Sc., selaku pembimbing utama dan dosen wali yang telah yang selalu memberikan bimbingan, dukungan, bantuan secara

materi dan psikis dan fasilitas terbaik kepada penulis selama penelitian dan kuliah

5. Prof. Dr. Eng Camellia Panatarani, M.Si., yang selalu memberikan ilmu, dukungan dan fasilitas terbaik kepada penulis selama menyelesaikan skripsi
6. Ferry Faizal, Ph.D., selaku pembimbing pendamping yang selalu memberikan bimbingan, saran dan masukan, bantuan, dukungan, fasilitas dan arahan terbaiknya kepada penulis
7. Dr. Wildan Abdussalam, yang selalu memberikan bimbingan, motivasi, bantuan, dan arahan yang membuat penulis selalu bersemangat saat menyelesaikan skripsi
8. Nurfauzi Fadillah yang telah memberikan bantuan, dukungan, fasilitas dan motivasi kepada penulis
9. P-Labs sebagai tempat penulis untuk membuat, merevisi dan menyelesaikan skripsi dengan menyenangkan
10. Ferdian, Syakir, Yoga, Felix, Hilmy, Ahmad, Victor, Naufal, Ghemma, Fahmi, Bayu, Reyhan, Budi, dan Urfan yang telah memberikan kebahagiaan, dukungan dan bantuan kepada penulis selama menyelesaikan skripsi
11. Seluruh civitas FiNder-U CoE yang membantu penulis menyelesaikan skripsi
12. Lutfi Naufal Ramadhika dan Lucia Patia Rochman yang telah memberikan

dukungan moril kepada penulis saat menyelesaikan skripsi

13. Atom 2017 yang telah mewarnai masa kuliah bersama-sama
14. Syahnaz, Elsha, Rika, Alya, Ahlam, Sabrina, Annisa yang membuat penulis selalu ceria
15. Tim KBK Instrumentasi dan Elektronika yang selalu membuat penulis bersemangat untuk mengerjakan skripsi

Penulis menyadari masih banyak kekurangan dalam penyusunan skripsi ini, karena itu penulis sangat membutuhkan kritik dan saran. Semoga skripsi ini dapat berguna dan bermanfaat bagi perkembangan ilmu pengetahuan dan teknologi di dunia khususnya di Indonesia. Dengan segala kerendahan hati, penulis menyadari bahwa skripsi ini masih memiliki banyak kekurangan dan jauh dari kesempurnaan. Oleh karena itu, kritik dan saran yang membangun sangat dibutuhkan oleh penulis. Semoga skripsi ini dapat bermanfaat bagi perkembangan ilmu dan teknologi serta bagi pihak-pihak yang membutuhkan.

Jatinangor, Juli 2021

Penulis

ABSTRAK

Revolusi Industri 4.0 adalah era digitalisasi, terkoneksi hampir semua aspek pada keseharian yang biasa disebut dengan *Internet of Things* (IoT), karena banyaknya data yang terintegrasi dan tersebar di internet, volume data menjadi besar karena itu disebut dengan *Big Data*. *Big data* merupakan kumpulan data dalam skala besar, yang mempunyai karakteristik data yang variatif, sangat cepat pertumbuhannya dan kompleksitas data yang tinggi. Data yang kompleks merupakan data yang tidak terstruktur yang perlu diolah khusus dengan suatu infrastruktur yang dapat mengelola data dalam volume besar. Dalam kasus ini, dengan menggabungkan aspek IoT dan *Big Data*, dilakukan perancangan sistem terintegrasi untuk memonitor dan juga kontrol untuk perangkat IoT berbasis pemrosesan *Big Data* menggunakan aplikasi *Apache Spark* dan *Hadoop* untuk kebutuhan analisis penggunaan daya listrik pada suatu sistem (perumahan, industri, dan lainnya). Sistem yang dirancang merupakan sistem yang *scalable* yang artinya sistem ini bisa beradaptasi jika dikemudian hari dilakukan penambahan fitur atau komponen IoT lain. Hasil dari penelitian ini berupa sistem terintegrasi (perangkat lunak dan perangkat keras) berbasis aplikasi web dan *mobile*, dari sistem yang sudah dirancang, telah mampu merespon dengan masukan data hingga visualisasi data dengan kecepatan masukan hingga 0.01 detik.

Kata kunci: *MapReduce, IoT, Sistem Kontrol, Monitoring, Big Data, Hadoop, Apache Spark*

ABSTRACT

The Industrial Revolution 4.0 is the era of digitalization, the connection of almost all aspects of everyday life that is commonly called the Internet of Things (IoT), because of the many integrated and most intense data on the internet, the volume of data becomes large because of that this called Big Data. Big data is a collection of data on a big scale, which has varied data characteristics, very fast growth and high data complexity. Complex data is unstructured data that needs to be processed specifically with infrastructure that can manage large volumes of data and on high velocity. In this case, by collaborating IoT and Big Data aspect, the goal for this research is to built an integrated system design for monitoring and control for IoT devices based on Big Data Processing that uses Apache Spark and Hadoop applications for the analysis of the use of electricity power on various system. The platform is designed to support a scalable-system that can be extend more feature or more measurement. The results of this research resulted an integrated systems (software and hardware) based on web and mobile applications. The system has successfully managed several parameters on high velocity data transfer (up to 100 data per second) to obtain information on electricity usage and anomaly from data produced by the sensors and visualization on nearly real-time.

Keywords: *MapReduce, IoT, Control System, Monitoring, Big Data, Hadoop, Apache Spark*

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN	i
KATA PENGANTAR	iv
ABSTRAK	v
ABSTRACT	vi
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL	xi
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Identifikasi Masalah	3
1.3 Batasan Masalah	3
1.4 Tujuan Penelitian	4
1.5 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	6
2.1 Kimia Organik	6
2.2 Graphene	7

2.3	Teori Hückel	9
2.4	Teori Pita	14
2.5	Spektrum Absorbansi	15
2.6	<i>Block Matrix</i>	16
2.7	<i>Big Data</i>	19
2.7.1	<i>Apache Spark</i>	21
BAB III METODE PENELITIAN		25
3.1	Perancangan Algoritma Penelitian	25
3.2	Alat yang Digunakan	26
3.2.1	Perangkat Lunak	26
3.2.2	Perangkat Keras	27
3.3	Perancangan Kode Komputasi	27
3.3.1	Perancangan Matriks Hamiltonian	27
3.3.2	Perancangan Kalkulasi Celah Energi	30
3.3.3	Perancangan Kalkulasi Celah Energi dengan <i>Python</i> dan <i>PySpark</i>	31
3.3.4	Perancangan Kalkulasi Absorbansi terhadap Perubahan Energi Eksitasi	32
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN		33
4.1	Hasil Kode Komputasi	33
4.1.1	Hasil Matriks Hamiltonian	33
4.1.2	Hasil Kalkulasi Celah Energi	33

4.1.3 Hasil Kalkulasi Celah Energi dengan <i>Python</i> dan <i>PySpark</i> .	33
4.1.4 Hasil Kalkulasi Absorbansi terhadap Perubahan Energi Eksitasi	33
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	34
5.1 Kesimpulan	34
5.2 Saran	34
DAFTAR PUSTAKA	34
DAFTAR LAMPIRAN	41
Matriks Hamiltonian	41

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	<i>Senyawa Metana</i> [8]	6
Gambar 2.2	<i>Struktur Graphene dan Graphite</i> [10]	7
Gambar 2.3	<i>Struktur Senyawa Graphene</i> [7]	8
Gambar 2.4	<i>Pembuatan Graphene dan Graphene Oxide dari Graphite</i> [13]	9
Gambar 2.5	<i>Orbital Molekul Etilen (C₂H₄)</i> [16]	10
Gambar 2.6	<i>Diagram HOMO dan LUMO pada suatu molekul</i> [21] .	14
Gambar 2.7	<i>Perbandingan Local Matrix, Row Matrix dan Block Matrix</i> [27]	17
Gambar 2.8	<i>Big Data dan Karakteristiknya</i> [28]	19
Gambar 2.9	<i>Grafik Ledakan Data terhadap Waktu Komputasi</i> [34] .	20
Gambar 2.10	<i>Apache Spark</i> [36]	21
Gambar 2.11	<i>Contoh Kasus RDD pada Spark</i> [38]	22
Gambar 2.12	<i>Alur Kerja Data pada Apache Spark</i> [41]	23
Gambar 3.1	<i>Diagram Alir Penelitian</i>	26
Gambar 3.2	<i>Indeks Struktur Empirik Graphene</i>	29
Gambar 3.3	<i>Skema Kerja PySpark</i>	31

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1	Karakteristik Big Data [31][32]	20
Tabel 2.2	Kelebihan dan Kekurangan Big Data [35]	21

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Kimia fisik adalah subdisiplin yang membahas tentang suatu kejadian physicochemical (fisiko-kimia) dengan menggunakan pendekatan secara atomik dan molekul dan benda terkondensasi dalam kacamata kefisikaan [1]. Karena kimia fisik, maka akan sangat-sangat berkaitan dengan unsur yang ada di table periodik. Mulai dari unsur Hidrogen (H) dengan nomor atom 1, hingga unsur Oganesson (Og) dengan nomor atom 118. Salah satu bidang tentang kimia yaitu Kimia Organik. Kimia organik mempelajari tentang struktur, sifat, komposisi, reaksi, dan preparasi senyawa yang mengandung unsur karbon (C). Kimia organik tidak hanya mempelajari tentang hidrokarbon saja, namun ikatan antara karbon dengan senyawa lain seperti hidrogen, nitrogen, oksigen, sulfur, fosfor, silikon dan halogen [2]. Salah satu senyawa kimia organik yang saat ini sedang diteliti yaitu graphene. Graphene merupakan salah satu senyawa kimia turunan dari grafit dengan penyusun unturnya adalah karbon yang saling berikatan satu sama lain [3]. Graphene merupakan bentuk lembaran (sheet) dari grafit. Karena molekul atom C dari graphene terdelokasi, maka kita bisa menghitung nilai energi dari orbital molekul graphene ini. Caranya adalah dengan menggunakan Teori Orbital Molekul Hückel atau sering disebut sebagai Metode Hückel [4].

Teori OMH ini memiliki karakteristik yaitu menggunakan operasi matriks untuk perhitungannya. Jika matriks yang digunakan masih berukuran kecil, maka dapat dilakukan dengan menggunakan operasi determinan biasa. Namun karena studi kasus yang dilakukan menggunakan graphene dengan jumlah atom karbon yang sangat banyak, maka besar matriks hamiltoniannya akan membesar dan menyebabkan operasi matriks yang digunakan adalah operasi eigen. Untuk dapat melakukan perhitungan besar energi orbital molekul maka akan dilakukan secara komputasi. Namun, besarnya ukuran matriks memengaruhi kecepatan komputasi untuk mencari solusi nilai eigen dari matriks tersebut. Ini berlaku untuk beberapa platform komputasi yang sering kita gunakan seperti MATLAB, Python dan lainnya.

Untuk menjawab permasalahan tersebut, maka diperlukannya operasi menggunakan sistem paralelisasi partisi. Dengan menggunakan paralelisasi partisi, kita bisa memanipulasi atau membagi sebuah matriks besar menjadi beberapa sub matriks kecil dan tetap mempertahankan kaidah matriks seperti biasanya [5]. Pekerjaan tiap sub matriks kecil tersebut akan dilakukan secara paralel di setiap core dari processor yang digunakan. Hal ini dapat mempercepat komputasi karena tidak perlu adanya waktu tunggu (latency) karena menunggu operasi sebelumnya [6].

Karena matriks dianggap suatu data, dan ukurannya sangat besar, maka akan sangat erat kaitannya dengan Big Data. Big Data singkatnya merupakan kumpulan data yang berukuran besar. Big Data memiliki beberapa karakteristik yang

terangkum dalam “6V’s of Big Data”. Karakteristik yang terpenting yaitu tentang volume karena ukurannya yang besar dan velocity karena memiliki kecepatan komputasi yang sangat cepat mendekati waktu nyata [7]. Maka dari itu, akan dilakukan operasi matriks menggunakan sistem Block Matrix dengan komputasi Big Data.

1.2 Identifikasi Masalah

1. Bagaimana pengaruh besar dimensi matriks terhadap laju komputasi yang dimiliki
2. Bagaimana pita energi yang dimiliki oleh Graphene
3. Bagaimana Spektrum Absorbansi terhadap Perubahan Energi dari Graphene

1.3 Batasan Masalah

1. Memerhatikan asumsi Hückel, yaitu:
 - (a) Menganggap semua ikatan adalah ikatan tunggal
 - (b) Hanya berinteraksi dengan tetangga terdekat (*First-Nearest Neighbor*)
 - (c) Elektron dalam ikatan- π 'merasakan' potensial elektrostatik diakibatkan oleh seluruh ikatan- σ
 - (d) Hanya melibatkan orbital elektron- π dan mengabaikan interaksi orbital elektron- σ dengan orbital elektron π

2. Menggunakan aplikasi *Apache Spark* dengan bahasa pemrograman *Python* dalam *PySpark*
3. Senyawa yang digunakan dalam perhitungan yaitu Graphene
4. Menggunakan dua buah *environment* server untuk kalkulasi:
 - (a) Google Cloud Instance Iowa (US)
 - (b) Server KST

1.4 Tujuan Penelitian

1. Dapat mengetahui hubungan antara besar celah energi tiap banyaknya atom yang terlibat
2. Mengetahui spektrum pita energi yang dimiliki oleh Graphene
3. Membandingkan performa komputasi menggunakan PySpark, dan Python dengan *module multiprocessing* dan *threading*
4. Membandingkan performa komputasi menggunakan Server Google Cloud dan Server KST

1.5 Manfaat Penelitian

1. Mengetahui sifat dan karakteristik, khususnya tentang energi orbital molekul dari Graphene

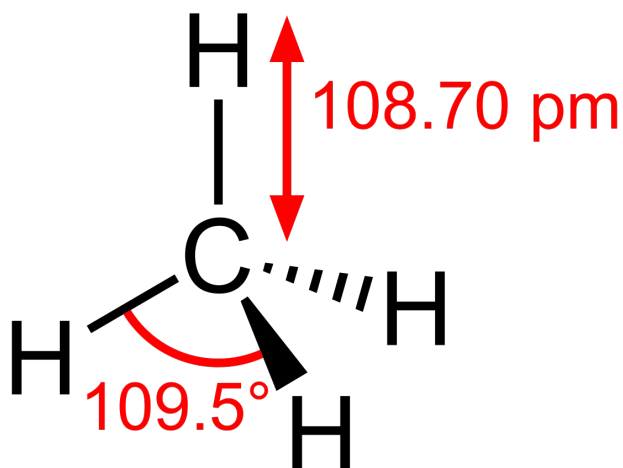
2. Menambah pengetahuan tentang Graphene
3. Mengetahui teknik pemrosesan matriks dengan laju komputasi tercepat

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Kimia Organik

Kimia organik merupakan bidang kimia yang mempelajari tentang struktur, sifat, komposisi, reaksi, dan preparasi senyawa yang mengandung unsur karbon (C). Kimia organik tidak hanya tentang hidrokarbon, namun mempelajari senyawa lain juga misal unsur karbon berikatan dengan unsur hidrogen (H), nitrogen (N), oksigen (O), halogen (golongan VII A), fosfor (P), silikon (Si) dan belerang (S) [2]. Kimia organik akan memerhatikan tentang sifat fisik dan kimia beserta evaluasi reaktivitas kimia untuk memahami perilaku dari senyawa tersebut.



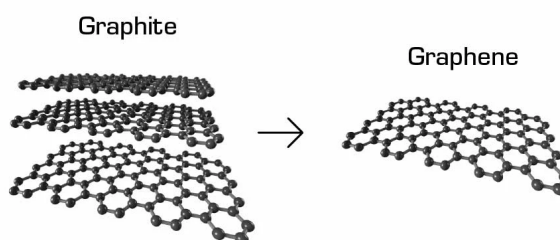
Gambar 2.1: Senyawa Metana [8]

Senyawa organik memiliki pola ikatan tunggal dan rangkap (rangkap dua dan tiga) karena karbon memiliki 4 elektron valensi yang menyebabkan karbon dapat

berikatan dengan 4 buah unsur yang berbeda [6]. Kimia organik sangatlah berguna untuk produk komersial dan juga produk sains. Seperti contohnya untuk kosmetik, pelumas, bahan petrokimia dan lainnya. Salah satu senyawa kimia organik yang saat ini sedang diteliti yaitu senyawa Graphene.

2.2 Graphene

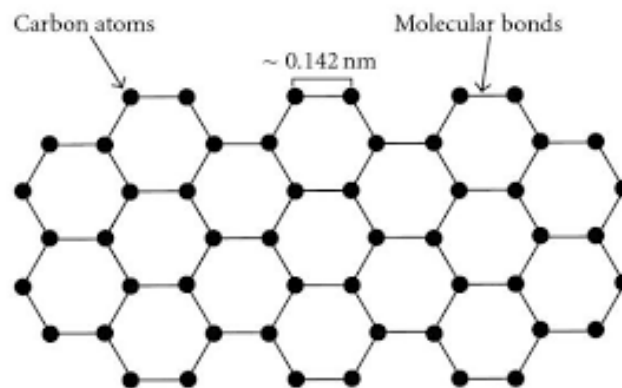
Graphene merupakan senyawa yang terdiri dari miliaran atom karbon (C) yang terbentuk seperti kisi heksagonal (atau sering disebut dengan sarang lebah) dan merupakan struktur fundamental untuk setiap bentuk karbon saat ini [7]. Senyawa graphene memiliki karakteristik tebal yang sangat tipis, fleksibel, kuat dan transparan [5]. Graphene lebih keras daripada Intan, namun lebih elastis daripada karet, lebih kuat daripada Baja dan lebih ringan daripada aluminium [9]. Graphene merupakan turunan dari karbon yang dijadikan lembaran dan berasal dari graphite.



Gambar 2.2: Struktur Graphene dan Graphite [10]

Graphene hanya terdiri dari atom C yang jarak antar atom C sebesar ± 0.142 nm [3] dan jarak interplanar nya 0.335 nm. Graphene memiliki mobilitas elektron lebih dari $15000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$. Dari sini bisa disimpulkan bahwa Graphene memiliki sifat kimia dan fisiknya yang sangat baik. Lalu karena Graphene adalah dasar dari

alotrop grafit, lalu dapat dibentuk menjadi fullerene 0D, digulung menjadi tabung nano (nanotube) 1D, dan ditumpuk menjadi grafit 3D, inilah sebabnya Graphene disebut sebagai induk dari grafit [11].

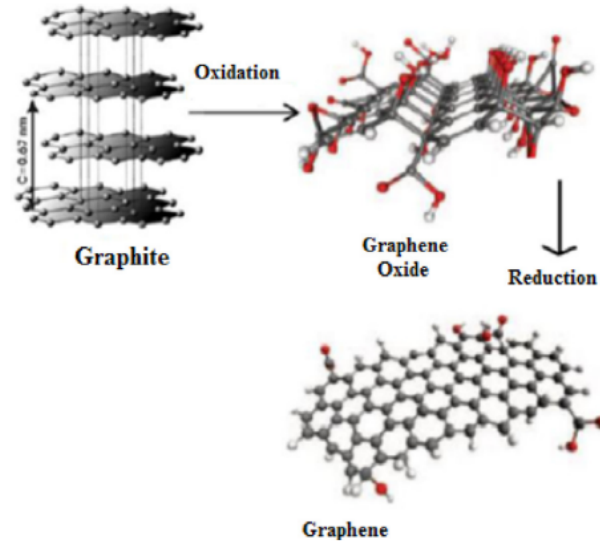


Gambar 2.3: *Struktur Senyawa Graphene* [7]

Aplikasi dari Graphene bisa digunakan menjadi resonator, saklar, katup, konduktor dan beberapa aplikasi lainnya [7].

Karena graphene mahal dan relatif sulit untuk dibuat, maka dilakukanlah cara lain yang lebih mudah dan murah untuk membuat senyawa yang seperti graphene. Maka dibuatlah turunannya dengan *dopping* oksida didalamnya yaitu *Graphene Oxide* [12]. Graphene Oxide dapat dihasilkan dari proses oksidasi Graphite dan jika ingin menghasilkan Graphene murni, maka diperlukan proses reduksi untuk memutus ikatan oksida yang terdapat pada Graphene Oxide. Graphene Oxide memiliki kelebihan yaitu memiliki siklus stabilitas yang lebih baik dibandingkan dengan Graphene, lalu performa yang baik dan yang terpenting mudah diproduksi [13]. Akibat dari adanya ikatan oksida, maka kapasitansi yang dimiliki oleh Graphene Oxide sangatlah tinggi dan menjadikan Graphene Oxide sebagai bahan

yang baik yang digunakan untuk superkapasitor.



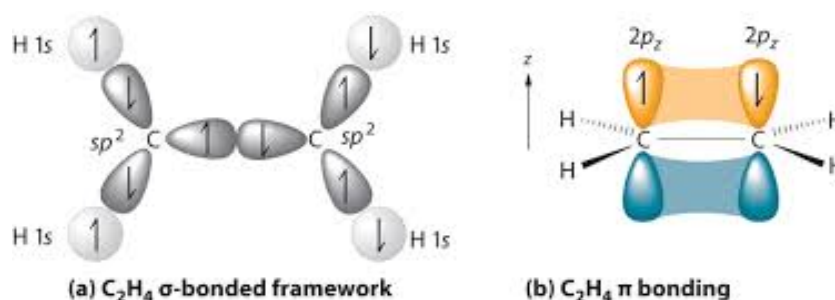
Gambar 2.4: Pembuatan Graphene dan Graphene Oxide dari Graphite [13]

Karakteristik dari Graphene bisa kita lihat, salah satunya mengenai energi yang dimiliki oleh orbital molekul Graphene. Untuk melihat energinya, kita dapat menggunakan suatu teori yang dikemukakan oleh Enrich Hückel yang bernama Teori Hückel.

2.3 Teori Hückel

Teori Hückel sangat erat kaitannya dengan teori orbital molekul. Orbital molekul merupakan suatu penggambaran daerah yang dapat ditempati oleh suatu elektron dalam suatu molekul. Orbital molekul menggunakan pendekatan Schrödinger untuk elektron dalam medan listrik di inti atom suatu molekul. Dengan menggunakan orbital molekul kita bisa melihat konfigurasi elektron molekul. Karena orbital molekul merupakan fermion, maka ia akan memenuhi

prinsip Pauli [14]. Orbital dari suatu molekul memiliki level energinya masing-masing. Ikatan antar unsur dalam suatu molekul disebut ikatan- σ . Misalkan, senyawa C_2H_4 (etilen), memiliki ikatan C=C dengan ikatan ganda, dan C-H dengan ikatan tunggal. Ikatan C=C dan C-H disebut ikatan- σ , dan karena hibridisasi dari etana memiliki elektron di $2p_x$ dan $2p_y$, maka orbital di $2p_z$ akan membentuk ikatan- π . Karena jarak antara ikatan- π dan ikatan- σ cukup jauh, menyebabkan interaksi antar ikatan π lebih besar daripada besar interaksi ikatan σ dan π . Maka kita bisa mengabaikan interaksi antara ikatan σ dan π [15]



Gambar 2.5: *Orbital Molekul Etilen (C_2H_4)* [16]

Dari sini, Hückel mengembangkan suatu teori dimana orbital molekul yang digunakan dapat dihitung energinya menggunakan teori elektron- π . Maka lahirlah Teori Orbital Molekul Hückel (Teori OMH) atau sering disebut dengan Teori Hückel. Dengan menggunakan teori Hückel, kita bisa melihat energi yang dihasilkan dari ikatan- π suatu molekul. Ia mengungkapkan bahwa orbital molekul yang dilambangkan oleh ψ adalah kombinasi linier dari orbital-orbital $2p_z$ dari semua atom karbon dalam suatu molekul [17]. Kombinasi linier orbital molekul sering disebut sebagai LCAO (*Linear Combination of Atomic Orbital*) [18]. LCAO

$2p_z$ ini dapat ditulis secara matematis dengan:

$$\psi = \sum_i c_i \phi_i \quad (2.1)$$

dengan ϕ_i adalah orbital $2p_z$ dalam atom karbon ke-i. Jika \hat{H} dianggap sebagai Hamiltonian efektif elektron-tunggal dalam molekul, maka berlaku:

$$\hat{H}\psi = \epsilon\psi \quad (2.2)$$

Persamaan (2.2) memenuhi persamaan sekuler:

$$\sum_j H_{ij} - \epsilon S_{ij} c_j = 0 \quad (2.3)$$

dengan

$$H_{ij} = \int \phi_i \hat{H} \phi_j dv \quad (2.4)$$

$$S_{ij} = \int \phi_i \phi_j dv \quad (2.5)$$

Integral yang ada di persamaan (2.4) bisa didefinisikan sebagai data empiris. Contohnya adalah H_{ii} adalah potensial ionisasi elektron- π di karbon ke-i dan $H_{i,i\pm 1}$ adalah energi yang dibutuhkan untuk elektron- π melompat ke atom terdekatnya.

Karena $S_{ii} = 1$ dan S_{ij} jauh lebih kecil daripada 1 maka dapat diabaikan. Maka,

$$\begin{aligned} & \alpha; i = j \\ & H_{ij} = \beta; j = i \pm 1 \\ & 0; \text{lainnya} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Singkatnya, persamaan (2.6) dapat menjadi sebuah persamaan matriks yang ditulis dengan,

$$\begin{bmatrix} H_{11} - ES_{11} & H_{12} - ES_{12} & \dots & H_{1j} - ES_{1j} \\ H_{21} - ES_{21} & H_{22} - ES_{22} & \dots & H_{2j} - ES_{2j} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{i1} - ES_{i1} & H_{i2} - ES_{i2} & \dots & H_{ij} - ES_{ij} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_j \end{bmatrix} = 0 \quad (2.7)$$

Karena $H_{ii} = \alpha$, $H_{ij} = \beta$, dan $S_{ij} = \delta_{ij} = 1$ jika $i = j$ dan akan bernilai 0 jika $i \neq j$.

Maka matriks Hamiltoniannya menjadi,

$$\begin{bmatrix} \alpha - E & \beta & 0 & \beta \\ \beta & \alpha - E & \beta & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \beta & 0 & \beta & \alpha - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_j \end{bmatrix} = 0 \quad (2.8)$$

Misalkan pada *Ethylene* memiliki 2 atom C yang menyebabkan matriks

Hamiltoniannya menjadi ukuran berukuran 2x2.

$$\begin{bmatrix} \alpha - E & \beta \\ \beta & \alpha - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = 0 \quad (2.9)$$

Energi orbital molekul dalam teori OMH didefinisikan dalam dua bentuk, yaitu energi dari sebuah elektron dalam orbital 2p yang disebut dengan α dan energi interaksi antara dua orbital 2p yang disebut dengan β [16][17].

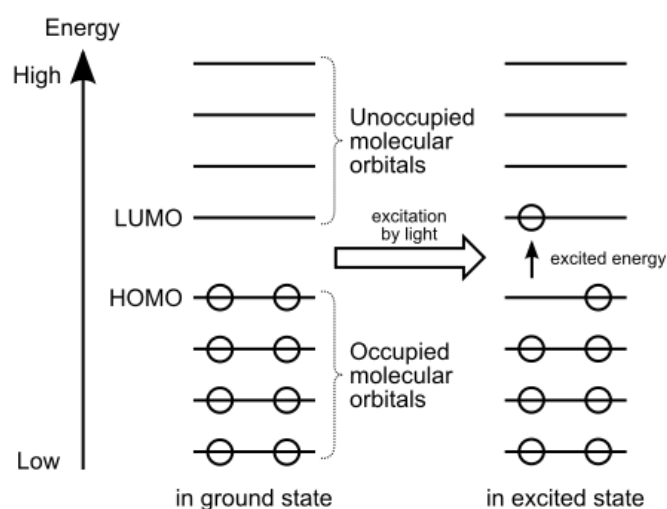
Dalam kasus ini, \hat{H} merupakan suatu matriks Hamiltonian yang menggambarkan keadaan orbital dari suatu molekul. Banyaknya atom karbon akan mempengaruhi besar matriks Hamiltonian yang didapat. Seperti misalkan benzene (C_6H_6) yang memiliki 6 atom karbon, maka matriks yang dihasilkannya berukuran 6x6. Jika dikaitkan dengan graphene yang memiliki jumlah atom C yang sangat banyak, maka matriks Hamiltonian yang dihasilkannya pun ukurannya akan sangat besar. Operasi yang akan digunakan yaitu operasi eigen. Hasil dari metode ini adalah energi orbital dari molekul uji yang digunakan. Aplikasi dari metode Hückel ini yaitu bisa menghitung celah pita [19], rapat elektron dan konduktivitas bahan [15]. Dari literatur, dikatakan bahwa pada Graphene besar $\alpha = -10.7$ eV dan $\beta = -1.58$ eV [5].

Sesuai persamaan Schrödinger tak bergantung waktu pada Persamaan (2.2), maka kita bisa memperlakukan persamaan tersebut sebagai persamaan eigen. \hat{H} sebagai operator, $|\psi\rangle$ sebagai fungsi gelombang, dan ϵ sebagai nilai eigen (*eigen*

energy). Tiap tingkatan eigen energy nya akan merepresentasikan keadaan energi dalam tiap orbital yang dimiliki oleh material tertentu. Sebelum menentukan lebar celah dari tingkat energi nya, perlu untuk memahami tentang teori pita terlebih dahulu.

2.4 Teori Pita

Dalam teori fisika zat padat, saat sebuah atom digabungkan dengan atom lainnya akan terjadi tumpang tindih fungsi gelombang elektron. Misalkan terdapat atom A dan B yang digabungkan. Jika tidak ada interaksi *bonding* dan *anti-bonding* nya, maka orbital yang dihasilkan adalah non ikatan, dimana elektron yang menempati orbital molekul terisi dan berenergi tinggi disebut *Highest Occupied Molecular Orbital* (HOMO), dan orbital molekul tidak terisi dan berenergi paling rendah disebut *Lowest Unoccupied Molecular Orbital* (LUMO) [20].



Gambar 2.6: Diagram HOMO dan LUMO pada suatu molekul [21]

Teori pita adalah suatu model yang menjelaskan keadaan sebuah elektron yang hanya memiliki sebuah keadaan energi spesifik tertentu [16]. Dalam sebuah senyawa, elektron akan menempati suatu tempat sesuai energi spesifik yang dimilikinya. Tempat inilah yang akan disebut sebagai pita energi. Sesuai dengan larangan Pauli (*Pauli Exclusion*) dimana tidak ada dua elektron yang memiliki bilangan kuantum yang sama. Jadi jika terdapat elektron lain, elektron tersebut akan membuat pita baru dan tidak akan menempati keadaan pita yang lainnya [22].

2.5 Spektrum Absorbansi

Pada gambar 2.6, saat terdapat cahaya berenergi tertentu ditembakkan, maka orbital yang berada di daerah HOMO akan memiliki energi berlebih. Akibatnya, orbital tersebut akan tereksitasi ke keadaan dengan energi yang lebih tinggi. Karena orbital tersebut tidak stabil saat berada di keadaan energi yang bukan keadaan asalnya, orbital tersebut akan de-eksitasi kembali ke keadaan awalnya dengan meng-emisikan energi berlebih yang ia serap menjadi suatu gelombang emisi [23]. Dari fenomena tersebut, kita bisa mengetahui celah pita yang dimiliki oleh senyawa tertentu dan bisa melihat energi yang di serap di tiap celah energinya dengan menggambarkan spektrum absorbansinya. Spektrum Absorbansi mengacu pada pengukuran penyerapan radiasi (melalui spektroskopi) sebagai fungsi energi atau panjang gelombang pada sebuah sampel. Untuk mencari absorbansi terhadap perubahan energi eksitasinya dapat menggunakan persamaan,

$$\tilde{G}(E) = \frac{1}{N} \sum_i^N |\tilde{G}^{(j)}|^2 \delta_{E,E_j} \quad (2.10)$$

dengan

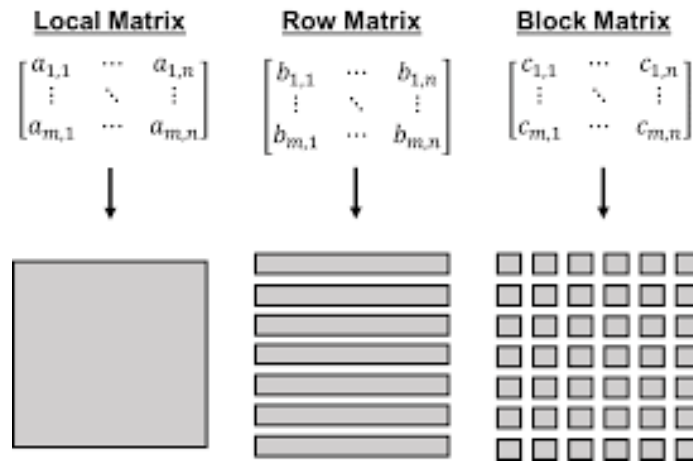
$$\tilde{G}^{(j)} = g \sum_i^N \langle \varphi_0 | \hat{\mathbf{g}}_{eg}^{(i)} + \hat{\mathbf{g}}_{ge}^{(i)} | \varphi_j \rangle \quad (2.11)$$

δ_{E,E_j} adalah delta *kronecker* dan E_j adalah *eigen energy* pada keadaan kolektif [24].

Dari penjelasan sebelumnya, permasalahan yang dihadapi yaitu ukuran matriks Hamiltonian yang sangat besar dan ini berefek pada laju komputasi yang akan kita lakukan. Hal tersebut bisa membuat laju komputasi menurun drastis karena proses komputasi yang sangat banyak dan tidak bisa dilakukan secara paralel. Untuk menjawab permasalahan tersebut, maka kita akan menggunakan operasi Block Matrix sebagai paralelisasi operasi matriks agar dapat dikerjakan dengan worker yang berbeda dan membantu dalam komputasi.

2.6 Block Matrix

Block Matrix merupakan salah satu operasi yang paling penting untuk meningkatkan kinerja komputasi. Dengan menggunakan Block Matrix maka operasi dapat diparalelisasi [25]. Block Matrix adalah operasi matriks dimana suatu matriks berdimensi besar akan dibagi menjadi beberapa sub matriks kecil [26].



Gambar 2.7: Perbandingan Local Matrix, Row Matrix dan Block Matrix [27]

Terlihat dari gambar bahwa Block Matrix akan membagi matriks yang awalnya berukuran sangat besar (yaitu Local Matrix), menjadi beberapa sub matriks kecil.

Misalkan kita memiliki matriks A dengan ukuran 4x4,

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

dengan menggunakan Block Matrix, maka matriks A dapat kita bagi menjadi 4 sub matriks yaitu $A_{11}, A_{12}, A_{21}, A_{22}$.

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

jika ditulis per submatriksnya menjadi,

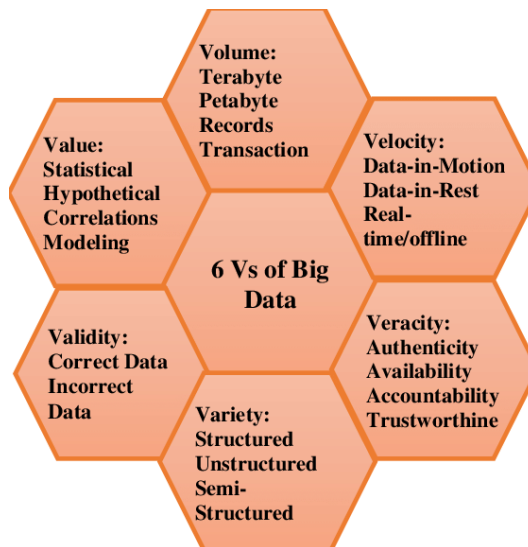
$$A_{11} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \quad A_{12} = \begin{bmatrix} a_{13} & a_{14} \\ a_{23} & a_{24} \end{bmatrix} \quad A_{21} = \begin{bmatrix} a_{31} & a_{32} \\ a_{41} & a_{42} \end{bmatrix} \quad A_{22} = \begin{bmatrix} a_{33} & a_{34} \\ a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

Salah satu metode Block Matrix adalah dengan menggunakan *Schur Decomposition*. Dekomposisi Schur akan membagi sebuah matriks menjadi 4 buah sub matriks dan menghitung determinan tiap sub matriksnya. Jika menggunakan persamaan (2.12), maka dekomposisi Schur nya menjadi

$$\det \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} = \det(A_{11}) * \det(A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}) \quad (2.15)$$

Karena elemen matriks yang didapatkan dari Graphene sangat banyak, dan diperlukan adanya sistem komputasi yang bisa memproses banyak data dengan kecepatan yang sangat tinggi. Maka kita akan menggunakan suatu metode menggunakan Big Data.

2.7 *Big Data*



Gambar 2.8: *Big Data dan Karakteristiknya* [28]

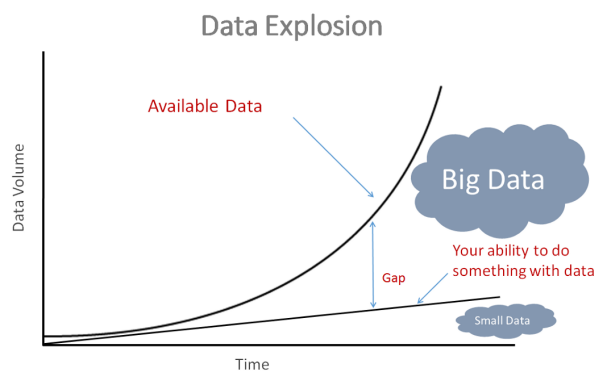
Big Data adalah salah satu metode cara memproses berbagai jenis data atau dalam literatur lain dikatakan bahwa *Big Data* adalah data yang berisi lebih banyak variasi yang datang dalam volume yang terus meningkat dan dengan kecepatan meningkat juga [29]. Data dibagi menjadi dua tipe, yaitu Data Terstruktur (data numerik), dan Data Tidak Terstruktur (teks, suara, gambar, dll) [30]. Secara makna, *Big Data* merupakan suatu data yang ukurannya sangat besar, bentuk yang tidak teratur, dengan komunikasi data kecepatan tinggi. *Big Data* memiliki 6 karakteristik yang disebut sebagai “6V’s of *Big Data*” yang tertera pada Tabel 2.1.

Big Data biasa disebut sebagai Not-Only Structured Query Language (NoSQL), hal ini berbeda dengan Relational Database Management System (RDBMS) atau basis data tradisional mulai dari variasi data untuk NoSQL bisa mencakup data semi terstruktur dan data tidak terstruktur, kecepatan baca-tulis (Read-Write) data

Tabel 2.1: Karakteristik Big Data [31][32]

Volume	Volume adalah salah satu hal yang menjadi feature dari Big Data. Berkaitan dengan hubungan antara ukuran dan kapasitas pemrosesan.
Velocity	Kecepatan pemrosesan Big Data sangatlah cepat, ini dikarenakan dari data yang dimilikinya sangat besar dan akan semakin membesar seiring banyaknya data yang masuk. Kecepatan yang dimiliki sangat cepat karena memanfaatkan data geolokasi, tren dan informasi input data.
Value	Value menjelaskan bahwa nilai yang akan diperoleh dari suatu data dan lebih bernilai dari stored data
Variability	Variability mengungkap tentang variable-variabel yang mempengaruhi proses komunikasi data dan pemrosesannya beserta kemungkinan terbaiknya.
Veracity	Veracity menunjukkan kualitas dan asal data, dan sebagai penyeleksian kebenaran dan keaslian data.
Variety	Variety menggambarkan bahwa didalam Big Data terdapat banyak variasi atau macam data yang akan diproses dan dianalisis. Bise berupa data numerik, audio video, bahkan teks.

dari Big Data yang sangat cepat (bergantung pada jumlah node) dan scalable [33].

**Gambar 2.9:** Grafik Ledakan Data terhadap Waktu Komputasi [34]

Beberapa kelebihan dan kekurangan jika menggunakan Big Data terdapat pada Tabel 2.2.

Terdapat beberapa *platform* yang sering digunakan dalam pengolahan Big Data,

Tabel 2.2: Kelebihan dan Kekurangan Big Data [35]

Kelebihan	Kekurangan
Pengambilan keputusan yang lebih baik	Kebutuhan akan <i>talent</i> yang profesional di bidangnya
Peningkatan produktivitas	Kualitas data
Mengurangi biaya	Perlunya perubahan budaya untuk menggunakan Big Data
Peningkatan layanan pelanggan	Peraturan yang mengatur tentang privasi data
Deteksi penipuan	Resiko keamanan
Peningkatan pendapatan	Perubahan yang cepat
Peningkatan agility	Kebutuhan perangkat keras pendukung
Inovasi yang lebih besar	Kecepatan lebih cepat dalam pemrosesannya
Kecepatan lebih cepat dalam pemrosesannya	Biaya

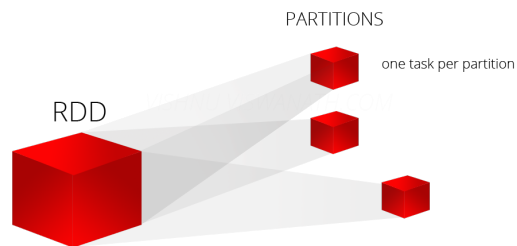
dan beberapa dan yang akan digunakannya adalah Apache Spark.

2.7.1 *Apache Spark*

**Gambar 2.10:** *Apache Spark* [36]

Apache Spark merupakan sebuah aplikasi mesin analitik yang terpadu untuk pemrosesan data berskala besar [36]. Apache Spark banyak digunakan di berbagai industri, seperti Netflix, Yahoo, dan eBay. Bahasa yang dapat digunakan dalam Apache Spark adalah *Scala*, *SQL* dan *Python*. Arsitektur data dari Spark berupa RDD (*Resilient Distributed Dataset*). *Resilient* berarti toleran terhadap kesalahan

dan dapat membuat data baru dari kesalahan tersebut, *Distributed* berarti data didistribusikan di antara beberapa node dalam sebuah cluster, dan *Dataset* berarti Kumpulan data yang berisi suatu nilai [37].



Gambar 2.11: Contoh Kasus RDD pada Spark [38]

Dengan menggunakan RDD, kita bisa melakukan beberapa hal seperti:

1. *Transformations* = Operasi ini dapat digunakan untuk membuat RDD baru
2. *Actions* = Operasi ini diaplikasikan pada RDD untuk menginstruksikan Apache Spark untuk menerapkan komputasi dan meneruskan hasilnya kembali ke driver

Kelebihan dari Spark adalah:

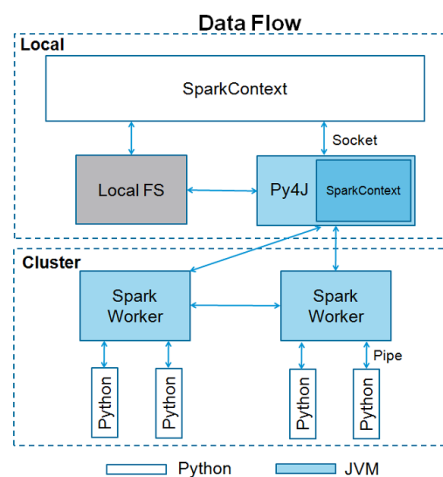
1. Kecepatan
Spark memiliki kecepatan 100x lebih cepat daripada Hadoop. Ini karena Spark menggunakan komputasi dan beberapa pengoptimalan lainnya.
2. Kemudahan dalam penggunaan
Spark memiliki antarmuka yang mudah digunakan untuk memproses Big

Data.

3. Aplikasi terpadu

Spark memiliki dukungan dan library yang sangat banyak, termasuk SQL, streaming data, machine learning, dan pemrosesan grafik. Salah satunya, spark dapat dioperasikan menggunakan library dari python yang disebut sebagai PySpark [39].

Apache Spark sangatlah cepat dalam pemrosesan data dikarenakan dalam kerjanya menggunakan *In-Memory Processing* yang berarti semua pekerjaan atau pemrosesan data yang dilakukan oleh Apache Spark akan di proses di dalam *memory*[40]. Untuk menggunakan fungsionalitas dari Spark, diperlukan *SparkContext* sebagai titik masuk aplikasinya. Untuk skema alur data nya dapat dilihat di Gambar 2.11[41].



Gambar 2.12: Alur Kerja Data pada Apache Spark [41]

Kegunaan Apache Spark atau lebih tepatnya PySpark pada penelitian ini adalah untuk memproses komputasi energi orbital dari Teori Hückel. Basis bahasa dari

PySpark adalah Python, namun karena karakteristik yang dimiliki PySpark yang akan membuat komputasi nya akan semakin cepat dan dibandingkan dengan laju komputasi menggunakan Python biasa.

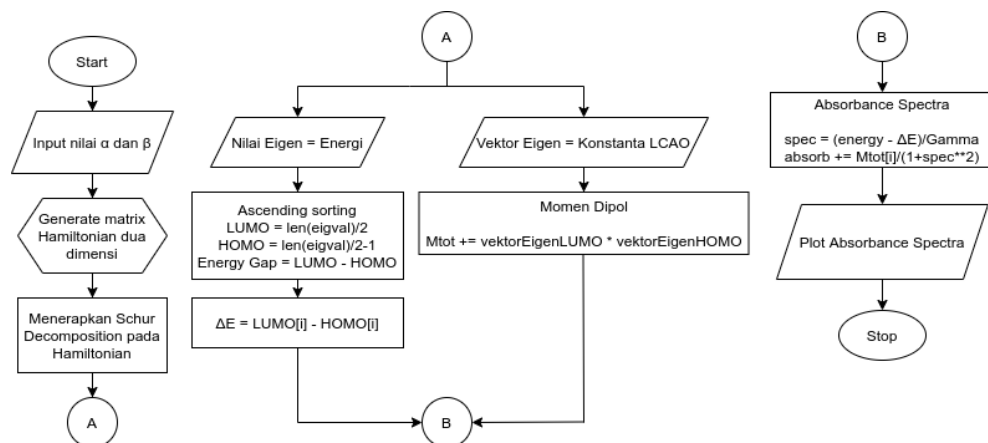
BAB III

METODE PENELITIAN

Penelitian Kalkulasi Nilai Eigen berbasis Matriks Hamiltonian menggunakan Teknik *Block Matrix* : Studi Kasus Pada *Graphene* dilakukan dengan 3 tahapan, yaitu perancangan algoritma penelitian, perancangan kode komputasi dan simulasi data. Perancangan algoritma penelitian akan membuat cara kerja aplikasi yang akan dibuat dimulai dari *Start* hingga komputasi berakhir. Dalam perancangan kode komputasi akan dibuat kode berbahasa *Python* yang akan dieksekusi oleh PySpark. Tahap terakhir adalah simulasi data. Simulasi data akan mensimulasikan kode yang sudah dibuat menggunakan perangkat komputer dengan spesifikasi yang ditentukan. Dari hasil simulasi data ini akan dilihat validitas dan performa komputasi yang dihasilkan.

3.1 Perancangan Algoritma Penelitian

Langkah-langkah penelitian dapat dilihat pada diagram alir penelitian pada Gambar 3.1



Gambar 3.1: Diagram Alir Penelitian

Dalam penelitian ini, akan dilakukan dengan beberapa tahap, yaitu pendefinisian, pemecahan matriks utama menjadi sub matriks kecil, diagonalisasi matriks, dan substitusi untuk dapat keluaran besar energi orbital molekul dari graphene dan laju konvergensi yang didapatkannya. Diawali dengan penginputan besar α dan β dari Graphene lalu akan dibuat matriks Hamiltoniannya. Lalu, matriks Hamiltoniannya akan dioperasikan menggunakan dekomposisi Schur untuk dapat dikerjakan secara paralel. Keluaran nya berupa nilai eigen dan vektor eigen. Nilai eigen sebagai energi orbital, dan vektor eigen merupakan konstanta fungsi gelombangnya. Dari kedua keluaran ini, akan dicari besar absorpsi setiap perubahan energi eksitasinya lalu dibuatkan grafik.

3.2 Alat yang Digunakan

3.2.1 Perangkat Lunak

1. *Python* versi 3.8.5
2. *Apache Spark* versi 3.0.1 dengan *PySpark*
3. *Apache Hadoop* versi 3.14

4. *Visual Studio Code* versi 1.56.2
5. *Gnuplot* versi 5.4 *patchlevel 1*

3.2.2 Perangkat Keras

1. Server KST
 - (a) Processor : Intel Xeon E3-1225; 4 Core @ 3.7 GHz
 - (b) RAM : 8 GB
 - (c) Sistem Operasi : Ubuntu 18.04 LTS
2. Server Google Cloud Instance Iowa (US)
 - (a) Processor : Intel Xeon Skylake; 4 vCore/vCPU @ 3.7GHz
 - (b) RAM : 16 GB
 - (c) Sistem Operasi : Ubuntu 20.04 LTS

3.3 Perancangan Kode Komputasi

3.3.1 Perancangan Matriks Hamiltonian

Pada perancangan kode komputasi ini akan membuat kode dalam bahasa *Python* yang akan dikonversi menjadi kode yang dapat dieksekusi di *PySpark*. Matriks Hamiltonian yang dimiliki oleh Graphene Oxide bersifat matriks dua dimensi. Lalu dalam penentuan ikatan nya akan dilakukan menggunakan penentuan posisi atom acak dua dimensi. Penentuan posisi \vec{A} yaitu dengan

$$\vec{A} = A_x + A_y \quad (3.1)$$

$$A_x = rand * L_x, A_y = rand * L_y \quad (3.2)$$

dengan $rand$ = angka acak, dan $L_x = L_y$ = panjang horizontal dan vertikal.

Untuk menentukan indeks cell dari matriks dapat menggunakan rumus:

$$index = A_y * L_x + A_x \quad (3.3)$$

Maka, dari indeks yang dihasilkan akan menjadi matriks seperti berikut

$$\begin{bmatrix} index_{11} & index_{12} & index_{13} \\ index_{21} & index_{22} & index_{23} \\ index_{31} & index_{32} & index_{33} \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

atau jika dijadikan angka indeks,

$$\begin{bmatrix} 9 & 8 & 7 \\ 6 & 5 & 4 \\ 3 & 2 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

angka indeks inilah yang akan digunakan dalam pembuatan fungsi matriks Hamiltonian.

Kemudian karena kita akan mencari koordinat $(index_x, index_y)$, maka kita harus mencari A_x dan A_y nya terlebih dahulu.

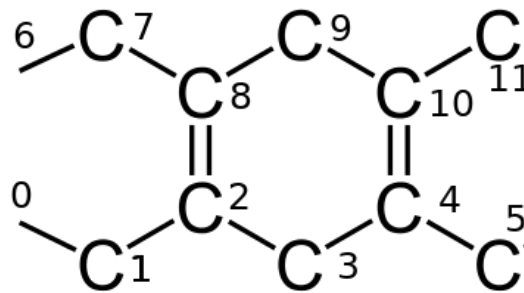
$$\begin{aligned} i_y &= index_x / L_x \\ i_x &= index_x - i_y * L_x \end{aligned} \quad (3.6)$$

Dari i_x dan i_y yang telah didapatkan, kemudian dicari $index_j$ nya dengan rumus,

$$index_j = j_y * L_x + j_x \quad (3.7)$$

dengan $j_y = i_y + dy$ dan $j_x = i_x + dx$.

Untuk menentukan atom mana saja yang terikat pada Graphene, kita bisa menurunkan dari ilustrasi pada Gambar 3.2.



Gambar 3.2: Indeks Struktur Empirik Graphene

Dari gambar ini terlihat bahwa tidak semua atom saling berikatan. Seperti contoh atom dengan indeks 1 tidak berikatan dengan atom indeks 7 dan hanya berikatan dengan atom indeks 0 dan 2. Lalu atom indeks 2 berikatan dengan indeks 1, 3 dan 8. Maka disini dilakukan pengondisian menggunakan vektor dengan rumus,

$$rad = \sqrt{dx^2 + dy^2} \quad (3.8)$$

Hasil yang didapatkan digunakan untuk pengondisian dalam variabelisasi elemen α dan β seperti pada persamaan (2.8) dengan pengondisian sebagai berikut:

$$\left\{ \begin{array}{l} rad = 0, H[i][j] = \alpha \\ rad = 1, mod(L_x) = 0, abs(i - j) = L_x, dan mod(i) = 1, H[i][j] = 0 \\ rad = 1, mod(L_x) = 1, mod(iy) = 0, abs(i - j) = L_x, dan mod(i) = 1, H[i][j] = 0 \\ rad = 1, mod(L_x) = 1, mod(iy) = 1, abs(i - j) = L_x, dan mod(i) = 0, H[i][j] = 0 \\ else, H[i][j] = \beta \end{array} \right. \quad (3.9)$$

3.3.2 Perancangan Kalkulasi Celah Energi

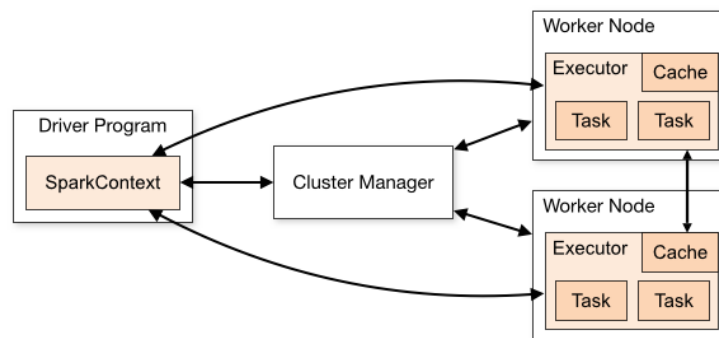
Matriks Hamiltonian yang didapat lalu diaplikasikan dengan teknik *Block Matrix* dengan menggunakan dekomposisi Schur. Dengan mengaplikasikan persamaan (2.15), akan didapatkan dua buah output yaitu nilai eigen dan vektor eigen. Nilai eigen akan menjadi energi orbital, dan vektor eigen akan menjadi koefisien fungsi gelombangnya (yaitu c pada persamaan (2.1)).

Energi orbital nya akan di urutkan secara *ascending* untuk menempatkan energi sesuai konsep HOMO dan LUMO. Setengah atas adalah HOMO, dan setengah bawah adalah LUMO. Untuk mencari celah pita nya, dapat menghitung perbedaan energi HOMO dan LUMO terluarnya,

$$E_{gap} = E_{LUMO \text{ terluar}} - E_{HOMO \text{ terluar}} \text{ (eV)} \quad (3.10)$$

3.3.3 Perancangan Kalkulasi Celah Energi dengan *Python* dan *PySpark*

Untuk mencari celah energi nya, akan dilakukan menggunakan 2 buah aplikasi yaitu *Python* dan *PySpark*. Untuk *Python* akan dilakukan dengan 3 variasi yaitu *Serial Processing*, *Multi Processing*, dan *Threading*. Dari 4 buah variasi komputasi ini, akan dilihat performa komputasinya melalui jumlah waktu yang dibutuhkan untuk memproses matriks Hamiltonian. Khusus untuk *PySpark*, akan dijalankan menggunakan (*spark-submit*) dengan 4 core di setiap workernya. Skema kerja dari *PySpark* adalah sebagai berikut:



Gambar 3.3: Skema Kerja PySpark

Dalam gambar 3.3 terlihat bahwa Spark menggunakan arsitektur master / slave. Seperti yang kita lihat pada gambar, ia memiliki satu koordinator pusat (*driver*) yang berkomunikasi dengan banyak *worker* (eksekutor) yang tersebar. *Driver* dan setiap *worker* menjalankan proses Python mereka masing-masing.

3.3.4 Perancangan Kalkulasi Absorbansi terhadap Perubahan Energi Eksitasi

Hasil dari kalkulasi energi eigen, lalu akan dihitung besar energi eksitasi dari HOMO ke LUMO dengan mengurangi tiap orbital LUMO dengan HOMO nya

$$\Delta E = E_{LUMO} - E_{HOMO} \text{ (eV)} \quad (3.11)$$

Untuk vektor eigen nya, dioperasikan untuk mencari momen dipol yang dimiliki oleh Graphene dengan mengalikan tiap kolom di daerah LUMO dengan tiap kolom di daerah HOMO. Secara matematisnya,

$$M_{total} = \sum_i^{N_{atoms}} c_{[i, LUMO]} * c_{[i, HOMO]} \quad (3.12)$$

Dengan menggabungkan hasil dari ΔE pada persamaan (3.11) dengan M_{total} pada persamaan (3.12), maka kita dapat mencari nilai absorbansinya dengan menggunakan persamaan (2.10).

BAB IV

HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1 Hasil Kode Komputasi

Pada bab ini, akan membahas mengenai hasil dari perancangan kode komputasi, seperti kalkulasi celah energi, kalkulasi celah energi dengan *Python* dan *PySpark* dan kalkulasi absorbansi terhadap perubahan energi eksitasi.

4.1.1 Hasil Matriks Hamiltonian

Dari perancangan matriks Hamiltonian, akan didapatkan sebuah matriks $m \times n$ 2 dimensi. Matriks ini akan menjelaskan keberadaan partikel dan ikatan yang dimiliki oleh partikel tersebut dengan tetangga terdekatnya. Karena hanya mengambil tetangga terdekatnya, maka jarak antar atomnya dapat dianggap satu ($r_{ij} = 1$)

4.1.2 Hasil Kalkulasi Celah Energi

4.1.3 Hasil Kalkulasi Celah Energi dengan *Python* dan *PySpark*

4.1.4 Hasil Kalkulasi Absorbansi terhadap Perubahan Energi Eksitasi

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

5.2 Saran

DAFTAR PUSTAKA

- [1] J. C. Slater. *Introduction to Chemical Physics*. 1939.
- [2] ACS. *Organic Chemistry*. 2020. URL: <https://www.acs.org/content/acs/en/careers/college> (visited on 07/27/2020).
- [3] Zhen Zhen and Hongwei Zhu. *Structure and properties of graphene*. Elsevier Inc., 2017, pp. 1–12. ISBN: 9780128126516. DOI: 10.1016/B978-0-12-812651-6.00001-X. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-812651-6.00001-X>.
- [4] B. Ribeiro and W Kusuma. “Aplikasi Metode Huckel dan Slater pada Orbital Molekul Untuk Menentukan Energi Ikatan Molekul”. In: (), pp. 1–28.
- [5] P. Ni. “Band gap of graphene nanoribbons calculated using Huckel molecular orbital theory”. In: *International Journal of Engineering and Applied Sciences* 2.3 (2015), p. 257979. ISSN: 2394-3661.
- [6] J. Clayden, N. Greeves, and S. Warren. *Organic Chemistry*. 2nd. Oxford, 2012.
- [7] C. B. Clemons et al. “Continuum plate theory and atomistic modeling to find the flexural rigidity of a graphene sheet interacting with a substrate”. In: *Journal of Nanotechnology* 2010 (2010). ISSN: 16879503. DOI: 10.1155/2010/868492.
- [8] Ben. *Metana*. 2016. URL: <https://id.wikipedia.org/wiki/Berkas:Methane-2D-dimensions.svg>.

- [9] Michael Berger. *What is Graphene?* 2019. URL: https://www.nanowerk.com/what_is_graphene.php.
- [10] Verjari. *Graphene clothing: Exceptional sports properties*. URL: <https://www.verjari.fr/en/blogs/articles/vetements-graphene-sport-clothes>.
- [11] Monisha Chakraborty and M. Saleem J. Hashmi. *Graphene as a Material – An Overview of Its Properties and Characteristics and Development Potential for Practical Applications*. Elsevier Ltd., 2018, pp. 1–17. ISBN: 9780128035818. DOI: 10.1016/b978-0-12-803581-8.10319-4. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-803581-8.10319-4>.
- [12] Metalgrass LTD. *Graphene batteries: Introduction and Market News*. 2019. URL: <https://www.graphene-info.com/graphene-batteries>.
- [13] Satiye Korkmaz and İ Af. “Graphene and graphene oxide based aerogels : Synthesis , characteristics and supercapacitor applications”. In: 27.September 2019 (2020). DOI: 10.1016/j.est.2019.101038.
- [14] F. Albert Cotton. *Chemical applications of group theory*. 3rd ed. New York: Wiley, 1990, p. 102.
- [15] Rustam E Siregar. *MEKANIKA KUANTUM MOLEKUL Struktur Elektronik Atom dan Molekul*. Jatinangor: Unpad Press, 2014. ISBN: 9786029238624.
- [16] Aradhana Anil and S. Ramasesha. *Huckel theory and Band theory: Computational approach*. Tech. rep. URL:

<http://reports.ias.ac.in/report/14114/huckel-theory-and-band-theory-computational-approach>.

- [17] Rustaman. “KEADAAN-KEADAAN TRANSISI MOLEKUL”. In: *Karya Tulis Ilmiah Kimia Unpad* (2008), pp. 1–21.
- [18] M. J. Mączyński. “A SIMPLE DERIVATION OF HUCKEL’S MOLECULAR ORBITALS IN THE FRAMEWORK OF QUANTUM LOGIC”. In: *Reports on Mathematical Physics* 30.1 (1991), pp. 81–88. DOI: [https://doi.org/10.1016/0034-4877\(91\)90042-L](https://doi.org/10.1016/0034-4877(91)90042-L).
- [19] Yutaka Imamura et al. “Extrapolation of polymer gap by combining cluster and periodic boundary condition calculations with Hückel theory”. In: *Chemical Physics Letters* 707 (2018), pp. 44–48. ISSN: 00092614. DOI: 10.1016/j.cplett.2018.07.023. URL: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2018.07.023>.
- [20] Risdiana. *Diktat Pengantar Fisika Zat Padat*. Jatinangor: Unpad, 2014.
- [21] Tomgelly. *Molecule HOMO-LUMO Diagram*. 2010. URL: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Molecule_HOMO-LUMO_diagram.svg.
- [22] Sarah Faizi and Craig Fisher. *Pauli Exclusion Principle*. 2021. URL: [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_\(Physical_and_Theoretical_Chemistry\)/Electronic_Structure_](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Electronic_Structure_)

of_Atoms_and_Molecules / Electronic_Configurations / Pauli_Exclusion_Principle (visited on 07/14/2021).

- [23] J P Bird. “Semiconductors: An Introduction”. In: ed. by K H Jürgen Buschow et al. Oxford: Elsevier, 2002, pp. 1–16. ISBN: 978-0-08-043152-9. DOI: <https://doi.org/10.1016/B0-08-043152-6/01854-4>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B0080431526018544>.
- [24] Wildan Abdussalam. “Dynamics of Rydberg atom lattices in the presence of noise and dissipation”. PhD thesis. Technischen Universität Dresden, 2017.
- [25] Tim Davis. “Block matrix methods: Taking advantage of high-performance computers”. In: (2004).
- [26] William Ford. *Numerical Linear Algebra with Applications: Editorial*. Vol. 10. 7. USA: Elsevier, 2003, p. 561. ISBN: 9780123944351. DOI: 10.1002/nla.335.
- [27] Patrick Pisciuneri. *How Target Performance Tunes Machine Learning Applications*. 2016.
- [28] Muhammad Saqlain et al. *A Classification Model for Predicting Heart Failure in Cardiac Patients*. 2017, pp. 36–43. ISBN: 978-3-319-51233-4. DOI: 10.1007/978-3-319-51234-1_6.
- [29] Oracle. *Big Data Defined*. 2020. URL: <https://www.oracle.com/big-data/what-is-big-data/>.

- [30] Nataliya Shakhovska et al. “Big data processing technologies in distributed information systems”. In: *Procedia Computer Science* 160.2018 (2019), pp. 561–566. ISSN: 18770509. DOI: 10.1016/j.procs.2019.11.047. URL: <https://doi.org/10.1016/j.procs.2019.11.047>.
- [31] Jose Moura and Carlos Serrao. “Security and Privacy Issues of Big Data”. In: 2015. ISBN: 9781466685055. DOI: 10.4018/978-1-4666-8505-5.ch002.
- [32] Seth Schaafsma. *Big Data: The 6 Vs You Need to Look at for Important Insights*. 2020. URL: <https://www.motivaction.nl/en/news/blog/big-data-the-6-vs-you-need-to-look-at-for-important-insights>.
- [33] Nurfauzi Fadillah. “Rancang Bangun Prototipe Sistem Pemrosesan Big Data untuk Analisis dan Pemantauan Sistem Daya Listrik”. PhD thesis. Universitas Padjadjaran, 2020.
- [34] Matthew Stewart. *Handling Big Datasets for Machine Learning - Towards Data Science*. 2019. URL: <https://towardsdatascience.com/machine-learning-with-big-data-86bcb39f2f0b>.
- [35] Chynthia Harvey. *Big Data Pros and Cons*. 2018. URL: <https://www.datamation.com/big-data/big-data-pros-and-cons.html>.
- [36] Apache. “Apache Spark”. In: (2018).
- [37] Swatee Chand. *PySpark Programming – Integrating Speed With Simplicity*. 2020. URL: <https://www.edureka.co/blog/pyspark-programming/>.

- [38] Krishna Kumar. *GitHub: Data Analytics*. 2018. URL: <https://kks32-courses.gitbook.io/data-analytics/spark/rdd#partitions>.
- [39] Databricks. *Apache Spark*.
- [40] Alex Bekker. *Spark vs. Hadoop MapReduce: Which big data framework to choose*. 2017. URL: <https://www.scnsoft.com/blog/spark-vs-hadoop-mapreduce>.
- [41] Tutorialspoint. *PySpark - SparkContext*. URL: https://www.tutorialspoint.com/pyspark/pyspark_sparkcontext.htm.

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Kode Python

```
1 import numpy as np
2 from scipy import linalg as la
3
4 def huckel(Lx, Ly):
5     """
6     Build hamiltonian matrix
7     """
8     N = Lx*Ly
9     H = np.zeros(shape = (N, N))
10    for atom_i in range(0,N):
11        alpha = -10.7
12        beta = -1.58
13        iy = int(atom_i/Lx)
14        ix = int(atom_i - Lx*iy)
15        #determine interaction with nearest neighbours
16        for dy in range(-1, 2):
17            for dx in range(-1, 2):
18                #determine coordinate atom_j
19                jx = ix + dx
20                jy = iy + dy
```

```

21
22     if jx>=0 and jx<Lx and jy>=0 and jy<Ly:
23         atom_j = int(jy*Lx + jx)
24         rsquare = dx * dx + dy * dy
25         rad = np.sqrt(rsquare)
26
27     if rad == 0:
28         H[atom_i][atom_j]= alpha
29
30     elif rad == 1:
31         if Lx%2 == 0 and abs(atom_i-atom_j)==Lx and atom_i%2 ==
32             1: #jika panjang x genap, dan atomi-atomj = panjang x
33             dan atom i ganjil
34             H[atom_i][atom_j]=0
35
36         elif Lx%2 == 1 and iy%2 == 0 and abs(atom_i-atom_j)==Lx
37             and atom_i%2==1: #jika panjang x ganjil, iy genap,
38             absolut dari atomi-atomj = panjang x dan atom i ganjil
39             H[atom_i][atom_j]=0
40
41         elif Lx%2 == 1 and iy%2 == 1 and abs(atom_i-atom_j)==Lx
42             and atom_i%2==0: #jika panjang x ganjil, iy ganjil, atomi
43             -atomj = panjang x dan atom i genap
44             H[atom_i][atom_j]=0
45
46     else :
47         H[atom_i][atom_j] = beta

```

```

38         else:
39             H[atom_i][atom_j] = 0
40
41     """
42     Calculating eigen energy with Schur Decomposition
43     """
44     eigval_schur, Z = la.schur(H)
45     eigval_schur = sorted(np.diag(eigval_schur))
46
47     """
48     Calculating eigen energy and eigen number
49     """
50     eigval, eignum = la.eig(H)
51     eigval = sorted(eigval) #sorting secara ascending
52
53     """
54     Calculating gap from eigen energy
55     """
56     indexHomo = int(len(eigval)/2-1) #nilai terkecil
57     indexLumo = int(len(eigval)/2) #nilai terbesar
58     Egap = eigval[indexLumo] - eigval[indexHomo] #dalam satuan elektronvolt
59
60     """

```

```

61     Calculating deltaE
62     """
63     dE = []
64     for indexEnergyLumo in range(0, indexLumo):
65         for indexEnergyHomo in range (0,indexHomo+1):
66             dE.append(eigval[indexEnergyLumo + indexLumo] - eigval[
67                 indexHomo - indexEnergyHomo])
68     """
69     Calculating dipole moment
70     """
71     energyNumber = int(len(eignum))
72     M = []
73     for indexEnergyLumo in range(0, indexLumo):
74         for indexEnergyHomo in range (0, indexHomo+1):
75             mtot = 0
76             for indexC in range(0, energyNumber):
77                 mtot += eignum[indexC][indexEnergyLumo + indexLumo] *
78                     eignum[indexC][indexHomo - indexEnergyHomo]
79             M.append(mtot)
80
81     Ms = sorted(M, reverse=True)
82     """

```



```

82         Calculating Absorbance Spectra
83         """
84         def dipole_moment(Ndiff, Gamma, E):
85             result = 0.0
86             for atom_i in range (0, Ndiff):
87                 disc = E - dE[atom_i]
88                 disc /= Gamma # gamma = width nya
89                 result+=(Ms[atom_i]/(1+disc**2))
90             return result
91
92     Npoints = 1000
93     x = np.linspace (0, 1, Npoints)
94     y_list = []
95
96     for i in range(0,Npoints):
97
98         y = dipole_moment(N, 0.01, x[i])
99         y_list.append(y.real)
100
101     return H, eigval, eignum, Egap, dE, Ms, x, y_list
102
103 def huckel_2(L): #only for calculating bandgap using mp and spark
104     """
105     Build hamiltonian matrix
106     """
107     N = L*2

```

```

105     H = np.zeros(shape = (N, N))
106     for atom_i in range(0,N):
107         alpha = -10.7
108         beta = -1.58
109         iy = int(atom_i/L)
110         ix = int(atom_i - L*iy)
111         #determine interaction with nearest neighbours
112         for dy in range(-1, 2):
113             for dx in range(-1, 2):
114                 #determine coordinate atom_j
115                 jx = ix + dx
116                 jy = iy + dy
117
118                 if jx>=0 and jx<L and jy>=0 and jy<2:
119                     atom_j = int(jy*L + jx)
120                     rsquare = dx * dx + dy * dy
121                     rad = np.sqrt(rsquare)
122
123                     if rad == 0:
124                         H[atom_i][atom_j]= alpha
125                     elif rad == 1:
126                         if L%2 == 0 and abs(atom_i-atom_j)==L and atom_i%2 == 1:

```

#jika panjang x genap, dan atomi-atomj = panjang x dan

```

                                atom i ganjil
127                                H[atom_i][atom_j]=0
128                                elif L%2 == 1 and iy%2 == 0 and abs(atom_i–atom_j)==L
                                and atom_i%2==1: #jika panjang x ganjil, iy genap,
                                absolut dari atomi–atomj = panjang x dan atom i ganjil
129                                H[atom_i][atom_j]=0
130                                elif L%2 == 1 and iy%2 == 1 and abs(atom_i–atom_j)==L
                                and atom_i%2==0: #jika panjang x ganjil, iy ganjil, atomi
                                –atomj = panjang x dan atom i genap
131                                H[atom_i][atom_j]=0
132                                else :
133                                H[atom_i][atom_j] = beta
134                                else:
135                                H[atom_i][atom_j] = 0
136
137                                """
138                                Calculating eigen energy and eigen number
139                                """
140                                eigval, eignum = la.eig(H)
141                                eigval = sorted(eigval)
142
143                                """
144                                Calculating gap from eigen energy

```

```
145         """
146         indexHomo = int(len(eigval)/2-1)
147         indexLumo = int(len(eigval)/2)
148         Egap = eigval[indexLumo] - eigval[indexHomo]
149
150     return H, eigval, eignum, Egap
```

Lampiran 2 Kode PySpark