

## ARTIKEL RISET

# Komputasi Rapat Keadaan h-BN Monolayer Menggunakan Metode Trotter Suzuki Orde Dua

Abdurrahman Al-Faruq<sup>1\*</sup> and Pekik Nurwantoro<sup>2</sup>

Received: Jan 11, 2023 | Accepted: Jul 05, 2023 | Published: Jul 07, 2023 | DOI: 10.22146/jfi.v27i1.81205

## Ringkasan

Telah dilakukan penelitian berupa perhitungan rapat keadaan h-BN monolayer dengan metode Trotter Suzuki orde dua. Metode Trotter Suzuki yang dilakukan menggunakan dekomposisi matriks Hamiltonian menjadi matriks segitiga atas (matriks *upper*) dan matriks segitiga bawah (matriks *lower*). Hasil berupa rapat keadaan kemudian dibandingkan dengan hasil dari perhitungan menggunakan metode Trotter Suzuki orde satu yang didekomposisi dengan blok-blok matriks. Metode Trotter Suzuki orde dua memiliki akurasi yang lebih tinggi dari metode Trotter Suzuki orde satu.

**Kata Kunci** : h-BN, Dekomposisi Trotter-Suzuki orde dua, metode rambatan waktu.

## Abstract

Research of calculating the density of monolayer h-BN conditions using the second order Trotter Suzuki method has been carried out. Trotter Suzuki method is carried out using the decomposition of the Hamiltonian matrix into an upper triangular matrix (upper matrix) and a lower triangular matrix (lower matrix). The results in the form of state density are then compared with the results by calculations using the first order Trotter Suzuki method which is decomposed by matrix blocks. The second-order Suzuki Trotter method has higher accuracy than the first-order Suzuki Trotter method.

**Keyword** : h-BN, Trotter-Suzuki decomposition second order, time-propagation methods.

## 1 PENDAHULUAN

Metode Trotter-Suzuki merupakan pendekatan numerik yang menyertakan perkalian eksponensial matriks. Matriks kompleks mengalami dekomposisi membentuk beberapa matriks untuk mempermudah perhitungan eksponensial matriks [1]. Dekomposisi Trotter-Suzuki orde tinggi dapat dikonstruksikan dengan berbagai cara, beberapa diantaranya adalah dengan dekomposisi fraktal dan dekomposisi Trotter-Suzuki Hybrid [2]. Implementasi metode numerik Trotter-Suzuki dapat dilihat dari beberapa penelitian lain, diantaranya adalah adanya varian terdistribusi dari algoritma Trotter-Suzuki berdasarkan implementasi efisiensi karnel [1], dan perhitungan rapat keadaan dari sistem disordered graphene [3].

Dalam beberapa tahun terakhir, para peneliti lebih memberikan fokus pada h-BN. Material ini terdiri

dari ikatan kuat hibridasi  $sp^2$  seperti *graphene* dengan parameter konstanta kisi  $a = 0.25$  nm [4]. Sifat material h-BN diantaranya yaitu mempunyai stabilitas termal tinggi yang memungkinkan untuk digunakan sebagai bahan baku pembuatan perangkat yang bekerja pada suhu tinggi, juga memiliki stabilitas kimia yang baik sehingga dapat menjadi coating material aktif lainnya [5]. Beberapa contoh penggunaan praktis material h-BN yakni sebagai pelumas untuk cat, kosmetik, pensil, dan semen yang diaplikasikan pada gigi.

Sifat-sifat elektronik dari sesuatu material bisa dikaji dengan melaksanakan perhitungan rapat keadaan ataupun *Density of State* (DOS). DOS menggambarkan banyaknya kondisi (*state*) yang bisa dihuni oleh elektron pada tiap tingkatan tenaga dalam satuan volume [6]. Perhitungan DOS dalam pendekatan model ikatan kuat bisa dicoba dengan melaksanakan diagonalisasi matriks Hamiltonian dari suatu sistem yang dikaji. Namun, bila sistem tersebut mempunyai dimensi yang besar, hendaknya diperlukan ongkos komputasi yang pula besar pula.

\*Correspondence: [abdurrahman.al.faruq@mail.ugm.ac.id](mailto:abdurrahman.al.faruq@mail.ugm.ac.id)

<sup>1</sup> Departemen Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta, Indonesia

Full list of author information is available at the end of the article

†Equal contributor

Sehingga, tata cara ini jadi tidak efisien lagi. Oleh sebab itu, diperlukan tata cara numerik lain buat memperoleh nilai rapat kondisi dari Hamiltonian sistem, ialah dengan metode rambatan waktu [7]. Dalam perihal ini, DOS diperoleh dengan transformasi Fourier terhadap fungsi korelasi yang dihasilkan dari pemecahan Persamaan Schrodinger Gayut Waktu (PSGW).

Pada penelitian ini, sistem yang ditinjau adalah h-BN monolayer. Pemodelan sistem menggunakan model ikatan kuat dengan tujuan untuk memudahkan dalam usaha mendapatkan matrik Hamiltonian. Monolayer h-BN akan dihitung dengan metode Trotter Suzuki namun dengan orde 2. Dengan orde yang semakin tinggi yakni orde 2 maka suku koreksi bertambah, sehingga diharapkan dengan bertambahnya suku koreksi dari metode tersebut, akurasi untuk menyelesaikan PSGW semakin tinggi. Penyelesaian PSGW menggunakan dekomposisi Trotter-Suzuki orde dua yang dikonstruksikan dengan dekomposisi fraktal. Dekomposisi matriks berupa matriks segitiga atas dan segitiga bawah dalam rangka penyederhanaan kajian komputasi.

## 2 METODE PENELITIAN

Heksagonal Boron Nitrit (h-BN) merupakan senyawa yang terdiri dari ikatan atom Boron dan Nitrogen yang membentuk struktur dua dimensi berbentuk heksagonal seperti sarang lebah. Penelitian ini menggunakan h-BN monolayer dengan model ikatan kuat. Sistem yang dikaji mengabaikan efek spin dan hanya menggunakan elektron pada orbital  $p_z$ . Secara umum bentuk Hamiltonian dari sebuah sistem banyak partikel dalam notasi kuantisasi pertama dituliskan sebagai (dengan mengabaikan suku interaksi elektron-elektron)

$$\hat{H} = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_i U(\hat{r}_i) + \dots \quad (1)$$

bagian pertama dari ruas kanan biasa dikenal sebagai operator energi kinetik dan bagian kedua dari ruas kanan biasa dikenal sebagai operator potensial. Karena elektron merupakan fermion, maka fungsi gelombang elektron  $\psi(r_1, \dots, r_N)$  dapat ditulis dalam basis ortonormal ruang Hilbert  $\{\phi_{\alpha 1}(r_1), \dots, \phi_{\alpha N}(r_N)\}$  sebagai suatu fungsi gelombang asimmetrik:

$$\begin{aligned} &\psi(r_1, \dots, r_N, t) \\ &= \sum_{\alpha 1 \dots \alpha N} c_{\alpha 1 \dots \alpha N}(t) \phi_{\alpha 1 \dots \alpha N}^A(r_1, \dots, r_N) \end{aligned} \quad (2)$$

dengan  $\phi_{\alpha 1 \dots \alpha N}^A(r_1, \dots, r_N)$  adalah basis asimmetrik yang didapatkan dari determinan Slater. Penyelesaian

bentuk Hamiltonian tersebut untuk sistem akan sangat sulit untuk sistem yang sangat besar ( $N \gg 1$ ) karena akan menyertakan  $N!$  Suku dari determinan Slater. Oleh karena itu, digunakan notasi kuantisasi kedua dalam kajian dinamika dalam banyak partikel [3].

Keadaan partikel dalam sistem kuantum dapat dijelaskan oleh operator yang disebut operator annihilasi ( $c$ ) dan kreasi ( $c^\dagger$ ). Kedua operator tersebut memenuhi relasi anti komutasi. Dengan menggunakan operator medan energi, didapatkan penyelesaian operator energi kinetik dari persamaan (1)

$$\begin{aligned} &\int dr \widehat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \widehat{\psi}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{ij}^N \int dr \left\{ \lambda^\dagger(\mathbf{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \lambda(\mathbf{r}) \right\} c_i^\dagger c_j \end{aligned} \quad (3)$$

$\left\{ \lambda^\dagger(\mathbf{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \lambda(\mathbf{r}) \right\}$  pada persamaan (3) dapat dianggap sebagai nilai skalar  $-t$  atau yang dinamakan dengan *hopping parameter*. Parameter tersebut menunjukkan keboleh jadian elektron untuk melompat dari suatu kisi ke kisi terdekatnya. Bagian operator energi potensial persamaan (1) dapat diselesaikan sebagai berikut

$$\begin{aligned} &\int dr \widehat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \widehat{\psi}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{ij}^N \int dr \left\{ \lambda^\dagger(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \lambda(\mathbf{r}) \right\} c_i^\dagger c_j \end{aligned} \quad (4)$$

$\int dr \left\{ \lambda^\dagger(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \lambda(\mathbf{r}) \right\}$  pada persamaan (4) dapat dianggap sebagai nilai skalar  $v$  yang juga disebut sebagai *onsite* potensial dari tiap-tiap atom penyusun sistem. Parameter ini menunjukkan energi potensial elektron pada orbital yang ditempati. Oleh karena itu, dengan mengganti persamaan (1), (2), dan (3) dapat ditulis kembali

$$\hat{H} = - \sum_{i,j} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_{i,j} v_{ij} c_i^\dagger c_j + \dots \quad (5)$$

Persamaan (5) Kemudian disebut sebagai Hamiltonian dalam bentuk kedua [8]. Pembentukan matriks Hamiltonian dilakukan dengan terlebih dahulu mengkonversi *hexagonal lattice* menjadi brickwall lattice. Matriks Hamiltonian yang akan digunakan dapat dibentuk dengan menggunakan persamaan (5). Indeks kolom  $i$  dan baris  $j$  pada matriks menunjukkan indeks kisi pada sistem yang diwakilkan oleh operator annihilasi dan kreasi  $c_i^\dagger c_j$ .

Parameter *hopping*  $-t_{ij}$  menunjukkan elektron dapat melakukan loncatan dari kisi  $i$  menuju kisi  $j$ . Sedangkan untuk kondisi  $i = j$ , terdapat parameter berupa potensial *onsite*  $v$  yang menggambarkan energi dari elektron. Sistem pada h-BN monolayer terdiri dari atom boron dan atom nitrogen, sehingga parameter onsite-nya pun terbagi menjadi parameter onsite boron dan onsite nitrogen.

Dalam upaya implementasi numerik, kisi segienam (*hexagonal*) graphene dapat diasumsikan sebagai sebuah kisi persegi yang tidak mengalami loncatan pada beberapa kisinya. Kisi ini kemudian juga dapat disebut sebagai *brickwall lattice*. Brickwall lattice menampilkan bahwasannya dalam satu kisi hanya memiliki 3 tetangga terdekat,. Jumlah 3 tetangga terdekat tersebut dengan kata lain menyatakan ada 3 kemungkinan loncatan elektron dari suatu kisi. Potensial onsite yang terjadi juga dapat diketahui adalah sejumlah atom penyusun dari sistem yang digunakan. Untuk sistem dengan jumlah atom sebanyak  $4 \times 4$ , dengan menggunakan persamaan (5) maka dapat ditulis matriks Hamiltonian sebagai

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} a & -t & 0 & -t & -t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t & b & -t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t & 0 \\ 0 & -t & a & -t & 0 & 0 & -t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t & 0 & -t & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t \\ -t & 0 & 0 & 0 & b & -t & 0 & -t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -t & a & -t & 0 & 0 & -t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t & 0 & 0 & -t & b & -t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -t & 0 & -t & a & 0 & 0 & 0 & -t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a & -t & 0 & -t & -t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t & 0 & 0 & -t & b & -t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t & a & -t & 0 & 0 & -t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t & -t & 0 & -t & b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t & 0 & 0 & 0 & b & -t & 0 \\ 0 & -t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t & a & -t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t & 0 & 0 & -t & b & -t \\ 0 & 0 & 0 & -t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t & 0 & -t & a \end{bmatrix} \quad (6)$$

Sebuah sistem dengan jumlah atom sebanyak  $N^2$  akan membentuk matriks Hamiltonian berupa sebuah matrik dua dimensi dengan ukuran  $N^2 \times N^2$ . Sebagaimana diperlihatkan persamaan (6), sistem dengan jumlah atom  $4 \times 4$  akan membentuk matriks Hamiltonian dengan ukuran  $16 \times 16$ . Jika diperhatikan secara lebih teliti, matriks Hamiltonian yang dihasilkan memiliki beberapa blok matriks yang berulang. Blok-blok matriks yang berulang tersebut memiliki ukuran matriks sebesar  $N \times N$ . Sistem dengan jumlah atom  $4 \times 4$  maka akan mempunyai blok matriks berukuran  $4 \times 4$ , di dalam matriks Hamiltonian berukuran  $16 \times 16$ . Maka dapat ditulis matriks Hamiltonian sistem dengan jumlah atom  $4 \times 4$  menjadi

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} X_a & Y & 0 & Z \\ Y & X_b & Z & 0 \\ 0 & Z & X_a & Y \\ Z & 0 & Y & X_b \end{bmatrix} \quad (7)$$

sehingga berdasarkan penjelasan tersebut, matrik Hamiltonian yang dimiliki oleh h-BN dengan jumlah atom  $N^2$  dituliskan sebagai berikut

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} X_a & Y & 0 & \cdots & Z \\ Y & X_b & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & Y \\ Z & 0 & \cdots & Y & X_b \end{bmatrix} \quad (8)$$

dengan  $X_a, X_b, Y$  dan  $Z$  masing-masing adalah blok matriks dengan ukuran  $N \times N$ . Blok-blok matriks tersebut dapat dituliskan sebagai

$$X_a = \begin{bmatrix} a & -t & 0 & \cdots & -t \\ -t & b & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & a & -t \\ -t & 0 & \cdots & -t & b \end{bmatrix} \quad (9)$$

$$X_b = \begin{bmatrix} b & -t & 0 & \cdots & -t \\ -t & a & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & b & -t \\ -t & 0 & \cdots & -t & a \end{bmatrix} \quad (10)$$

$$Y = \begin{bmatrix} -t & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & -t & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (11)$$

$$Z = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -t & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -t \end{bmatrix} \quad (12)$$

yang mana notasi  $t$  adalah *hopping parameter* dengan nilai 2.55, notasi  $a$  adalah onsite energi Nitrit dengan nilai 4.5 dan  $b$  adalah onsite energi Boron dengan nilai 0 [9].

Hamiltonian digunakan untuk penyelesaian Persamaan Schrodinger Gayut Waktu (PSGW). Sebuah partikel yang bergerak dalam sistem kuantum non-relativistik, dapat diungkapkan dengan (PSGW) sebagai berikut

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = \hat{H} \psi(r, t) \quad (13)$$

yang mana  $\psi(t)$  adalah keadaan sistem yang dideskripsikan oleh Hamiltonian  $\hat{H}$ . Sehingga, solusi untuk sistem tersebut adalah [1]

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\psi(0)\rangle \quad (14)$$

atau dalam bentuk lain [10]

$$\psi(x, t) = \hat{U}(t) \psi_0(x) \quad (15)$$

dimana  $4|\psi(0)\rangle$  merupakan keadaan awal sistem yang ternormalisasi. Dengan  $\hat{H}$  merupakan Hermitian, dapat dinyatakan bahwa operator tersebut adalah uniter dan normalisasi vektor keadaan akan konstan sepanjang waktu. Solusi numerik dari operator evolusi adalah uniter. Persamaan (14) dan (15) kembali dilihat, karena secara eksplisit Hamiltonian tidak bergantung pada waktu, operator evolusi dinyatakan

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t} \quad (16)$$

dengan  $\hat{U}$  merepresentasikan operator evolusi waktu. Dalam menghitung solusi numerik, penting untuk menghindari konstanta yang sangat kecil maupun terlalu besar, sehingga konstanta dinormalisir menjadi  $\hbar = 1$ .

Kalkulasi terhadap suatu eksponensial matriks memerlukan upaya yang cukup besar. Hali ini dikarenakan, eksponensial matriks berbeda dengan eksponensial biasa. Sebuah fungsi eksponen  $e^x$  dijabarkan sebagai [11]

$$e^x = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{x}{n}\right)^n \quad (17)$$

atau

$$e^x = I + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^m}{m!} + \cdots \quad (18)$$

Kedua persamaan (17) dan (18) merupakan suatu cara menghitung  $e^x$  secara numerik. Persamaan (18) lebih nyaman dan sering digunakan, dikarenakan persamaan (18) lebih konvergen daripada persamaan (17)[11]. Persamaan tersebut dapat dihitung dengan lebih mudah apabila nilai dari variabel  $x$  adalah suatu bilangan. Untuk eksponensial matriks, nilai variabel  $x$  adalah matriks. Semakin besar suku dari persamaan (18), maka akan semakin besar pula orde pangkat dari matriks sehingga perhitungan akan semakin sulit. Kompleks pengerjaan juga akan bertambah dengan adanya pertambahan ukuran matriks dari eksponensial matriks. Oleh karena itu, diperlukan pendekatan untuk mendapatkan hasil kalkulasi eksponensial matriks. Salah satu dari upaya yang dapat dilakukan adalah dengan menggunakan algoritma dekomposisi Trotter Suzuki.

Ide dari algoritma Trotter Suzuki adalah mendekomposisi matriks evolusi menjadi beberapa

bagian agar dapat lebih mempermudah dalam tahap kalkulasi. Eksponensial yang mengandung dua operator menurut persamaan Trotter dapat ditulis

$$e^{x(A+B)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( e^{\frac{x}{n}A} e^{\frac{x}{n}B} \right)^n \quad (19)$$

atau dapat ditulis [21]

$$e^{x(A+B)} = \left( e^{\frac{x}{n}A} e^{\frac{x}{n}B} \right)^n + \mathcal{O} \left( \frac{x^2}{n} \right) \quad (20)$$

maka bentuk sederhana dari dekomposisi Trotter Suzuki orde satu adalah [12]

$$e^{x(A+B)} = e^{xA} e^{xB} + \mathcal{O}(x^2) \quad (21)$$

Persamaan (21) merupakan pendekatan Trotter Suzuki orde pertama dengan  $x$  adalah parameter,  $A$  dan  $B$  merupakan operator sembarang dengan hubungan komutasi  $[A, B] \neq 0$ . Secara umum, dekomposisi Trotter Suzuki dengan eksponensial operator lebih dari satu dapat ditulis [13]

$$S_1(x, \{H_q\}) = \prod_{q=1}^p e^{-ixH_q} \quad (22)$$

Secara umum persamaan Trotter Suzuki untuk dekomposisi orde yang lebih tinggi dapat dituliskan sebagai [14]

$$e^{x(A+B)} = e^{p_1xA} e^{p_2xB} e^{p_3xA} e^{p_4xB} \dots e^{p_mxB} + \mathcal{O}(x^{m+1}) \quad (23)$$

dengan  $p = \{p_1, p_2, p_3, p_4, \dots, p_m\}$  merupakan parameter dan koreksi dengan orde yang lebih tinggi  $x^{m+1}$ . Dekomposisi Trotter Suzuki orde tinggi dapat dikonstruksikan dengan salah satunya adalah dekomposisi fraktal. Persamaan (23) juga disebut sebagai dekomposisi bentuk koreksi orde tinggi.

Persamaan pendekatan orde dua diperoleh dengan mesimetrisan persamaan pendekatan orde pertama [13]

$$S_2(x) = S_1 \left( \frac{x}{2}, \{H_q\} \right) S_1^\dagger \left( \frac{x}{2}, \{H_q\} \right) \quad (24)$$

dari simetri persamaan pendekatan orde satu maka didapat pendekatan orde dua

$$S_2(x) = e^{\frac{x}{2}A} e^{xB} e^{\frac{x}{2}A} = e^{x(A+B)+x^3R_3+x^5R_5+\dots} \quad (25)$$

sehingga persamaan eksponensial operator pendekatan orde dua dapat ditulis sebagai [15]

$$e^{x(A+B)} = e^{\frac{x}{2}A} e^{xB} e^{\frac{x}{2}A} + \mathcal{O}(x^3) \quad (26)$$

dengan  $\mathcal{O}$  adalah suku koreksi. Orde yang semakin tinggi maka akan membuat suku koreksi bertambah, sehingga dengan bertambahnya suku koreksi akurasi untuk menyelesaikan PSGW semakin tinggi [2].

Algoritma Trotter Suzuki orde dua digunakan untuk menyelesaikan operator evolusi waktu sesuai persamaan (16). Secara matematis ruas kiri dan kanan pada persamaan (21) maupun (26) berbeda karena adanya suku koreksi pada ruas kanan. Namun hal tersebut masih dapat diterima metode ini memberikan nilai yang baik secara kualitatif pada hasil perhitungan rapat keadaan yang telah dilakukan penelitian sebelumnya. Selain itu, parameter  $x$  yang akan digunakan memiliki ukuran nilai yang kecil. Penguraian matriks Hamiltonian dengan metode Trotter Suzuki dapat memberikan kemudahan dalam kalkulasi karena memberikan bentuk eksponensial matriks yang lebih sederhana dibandingkan matriks Hamiltonian sebelumnya.

Langkah utama dari metode Trotter Suzuki adalah menguraikan matriks Hamiltonian menjadi matriks yang lebih sederhana. Matriks Hamiltonian  $(\hat{H})$  didekomposisi sehingga dapat ditulis ulang sebagai penjumlahan dari matriks diagonal, matriks segitiga atas (*upper*), dan matriks segitiga bawah (*lower*). Dengan demikian kalkulasi eksponensial matriks akan lebih mudah. Matriks Hamiltonian ditulis sebagai

$$\hat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{H}_1 \quad (27)$$

di mana  $\widehat{H}_0$  merupakan matriks hasil dekomposisi Hamiltonian berupa matriks upper  $\widehat{H}_u$ , matriks lower  $\widehat{H}_l$ , dan  $\widehat{H}_1$  merupakan matriks hasil dekomposisi berupa matriks diagonal Hamiltonian atau dapat juga dinotasikan sebagai  $\widehat{H}_d$ . Matriks  $\widehat{H}_0$  kemudian dapat ditulis kembali menjadi

$$\widehat{H}_0 = \widehat{H}_u + \widehat{H}_l \quad (28)$$

Nilai  $\widehat{H}_u$ ,  $\widehat{H}_l$ ,  $\widehat{H}_d$  ditampilkan sebagai berikut

$$\widehat{H}_u = \begin{bmatrix} 0 & -t & 0 & \cdots & -t \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & -t \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (29)$$

$$\widehat{H}_l = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -t & 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ -t & 0 & \cdots & -t & 0 \end{bmatrix} \quad (30)$$

$$\widehat{H}_d = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & a & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & b \end{bmatrix} \quad (31)$$

Berdasarkan penjabaran tersebut, maka persamaan (27) menjadi hasil dekomposisi pendekatan Trotter Suzuki terhadap operator evolusi waktu di persamaan (16). Operator evolusi waktu berubah menjadi

$$\widehat{U}(t) = e^{-i\widehat{H}t} = e^{-i\widehat{H}_0t} e^{-i\widehat{H}_1t} \quad (32)$$

persamaan (32) merupakan hasil dekomposisi Trotter Suzuki orde 1. Sedangkan untuk hasil dekomposisi orde 2 dapat ditulis

$$\widehat{U}(t) = e^{-i\frac{\widehat{H}_1}{2}t} e^{-i\widehat{H}_0t} e^{-i\frac{\widehat{H}_1}{2}t} \quad (33)$$

Sesuai yang telah dijelaskan, bahwa  $\widehat{H}_0$  merupakan matriks yang terdiri dari matriks upper dan matriks lower. Kedua matriks tersebut didekomposisi lagi dengan metode Trotter Suzuki orde 2, sehingga bentuk akhir operator evolusi waktu hasil dekomposisi Trotter Suzuki orde 2 adalah

$$\widehat{U}(t) = e^{-i\frac{\widehat{H}_1}{2}t} e^{-i\frac{\widehat{H}_u}{2}t} e^{-i\widehat{H}_l t} e^{-i\frac{\widehat{H}_u}{2}t} e^{-i\frac{\widehat{H}_1}{2}t} \quad (34)$$

Langkah pengambilan pembagian dekomposisi matriks pada persamaan (28) dimaksudkan untuk menjaga bentuk dari matriks segitiga atas dan matriks segitiga bawah. Matriks segitiga atas (*upper*) merupakan matriks yang memiliki nilai di bagian atas elemen diagonalnya, sedangkan untuk seluruh elemen diagonal dan di bawah diagonal bernilai 0. Begitupun

matriks segitiga bawah (*lower*) merupakan matriks yang memiliki nilai di bagian bawah diagonalnya, sedangkan untuk seluruh elemen diagonal dan di atas diagonal bernilai 0. Oleh karena itu, dekomposisi matriks dengan bentuk persamaan (28) diperlukan untuk sistem h-BN yang mana elemen diagonalnya tidak nol. Dekomposisi secara langsung menjadi matriks upper dan lower dapat dilakukan pada sistem yang memiliki elemen diagonal matriks bernilai 0, yakni seperti pada sistem graphene.

Matriks *upper* dan *lower* memiliki beberapa keistimewaan. Dengan mengetahui matriks Hamiltonian adalah matriks simetri, maka dapat dinyatakan bahwa matriks *upper* merupakan transpose dari matriks *lower*, begitu pula sebaliknya. Sifat dasar dari eksponensial matriks adalah

$$e^{X^T} = (e^X)^T \quad (35)$$

di mana  $X^T$  adalah transpose matriks  $X$ . Keistimewaan lainnya adalah, matriks *upper* dan *lower* memiliki sifat nilpotent. Sebuah matriks dikatakan memiliki sifat nilpotent apabila dikalikan dengan matriks itu sendiri terus menerus, akan menghasilkan nilai 0. Secara matematis, matriks  $N$  dikatakan nilpotent apabila

$$N^q = 0 \quad (36)$$

dengan  $q$  adalah bilangan integer atau bilangan cacah. Sifat nilpotent ini kemudian menjadi pertimbangan dalam perhitungan matriks eksponensial seperti yang dijabarkan pada persamaan (21). Perkalian berulang matriks akan menghasilkan nilai 0 pada suku tertentu sebagai hasil dari sifat nilpotent matriks, entah berapapun besar matriksnya.

Rapat keadaan mengukur jumlah keadaan energi yang dapat ditempati elektron dalam interval energi tertentu. Saat pita elektron bergerak lebih dekat ke pusat diagram pita energi, nilai rapat keadaan akan naik. Sementara itu, dengan menyelesaikan operasi matematis antara rapat keadaan dan fungsi distribusi Fermi-Dirac, dimungkinkan untuk mengetahui jumlah elektron dalam interval energi tertentu yang biasanya digunakan untuk menentukan sifat transportasi material [16]. Oleh karena itu, besaran rapat keadaan memiliki andil penting dalam indikasi karakteristik tertentu dari suatu material [17]. Persamaan rapat keadaan dapat dituliskan dalam bentuk fungsi korelasi  $\mathcal{C}(t)$  [18]

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}(E) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iEt} \langle \psi(0) | e^{-iHt} \psi(0) \rangle dt \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iEt} \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle dt \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iEt} \mathcal{C}(t) dt \quad (37)
\end{aligned}$$

Fungsi korelasi dapat dianggap sebagai fungsi dengan domain waktu. Transformasi Fourier digunakan untuk menghitung rapat keadaan dalam domain energi. Ada beberapa cara untuk mengimplementasikan Transformasi Fourier dalam perhitungan numerik, namun *Fast Fourier Transform* (FFT) dengan orde  $N \log(N)$  dapat berjalan lebih cepat daripada *Discrete Fourier Transform* (DFT) yang berorde  $N^2$  untuk data besar hingga ukuran  $N$  [19].

Proses dari penyelesaian PSGW dengan dekomposisi Trotter-Suzuki orde dua untuk mendapatkan rapat keadaan dapat digambarkan dengan flowchart pada gambar 1.

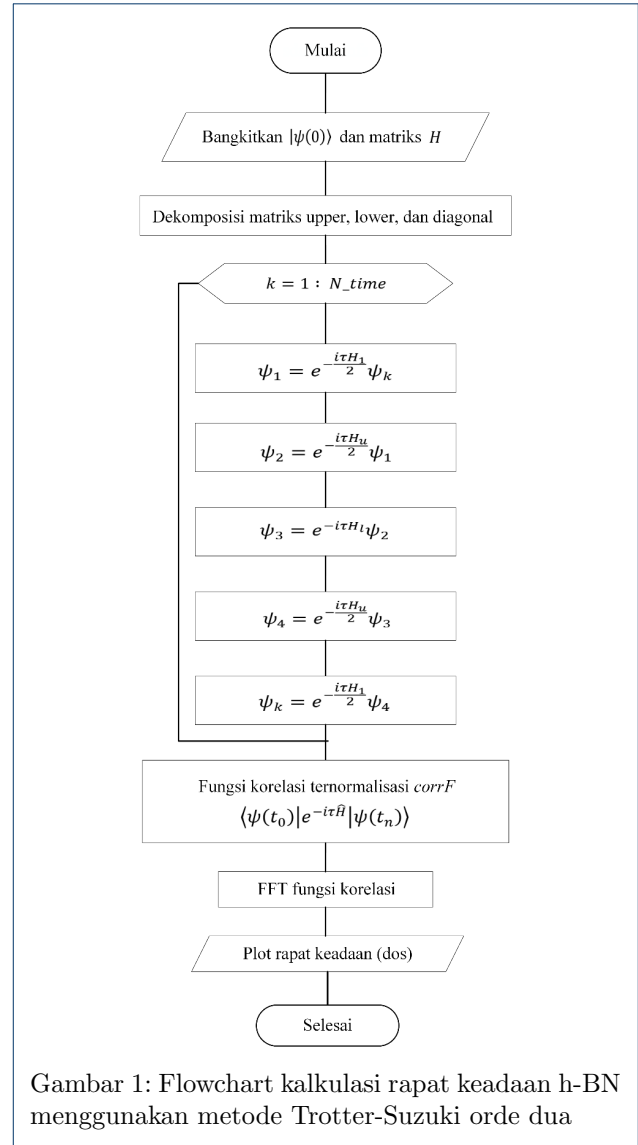
### 3 HASIL DAN PEMBAHASAN

Rapat keadaan hasil kalkulasi merupakan h-BN monolayer dengan jumlah atom  $8 \times 8$ ,  $16 \times 16$ ,  $32 \times 32$  dan  $64 \times 64$ . Hasil tersebut kemudian dibandingkan dengan hasil kalkulasi menggunakan dekomposisi Trotter Suzuki orde 1 [20]. Hasil perbandingan dari kedua metode dapat dilihat pada gambar 2.

Gambar 2 merupakan perbandingan rapat keadaan h-BN menggunakan metode Trotter Suzuki orde 1 dan orde 2 pada jumlah atom  $8 \times 8$ . Kedua metode membentuk hasil dengan pola yang sama yaitu terdapatnya celah pita energi yang menjadi ciri khas dari rapat keadaan h-BN dan tidak terdapat pada graphene. Adapun perbedaan dikarenakan jumlah atom yang digunakan masih terbilang cukup kecil sehingga pola gelombang tidak sama. Menurut [20] semakin banyak atom penyusun sistem maka semakin halus pula grafik rapatnya. Besarnya celah pita energi mengikuti persamaan [21].

$$E_g = \varepsilon_N - \varepsilon_B \quad (38)$$

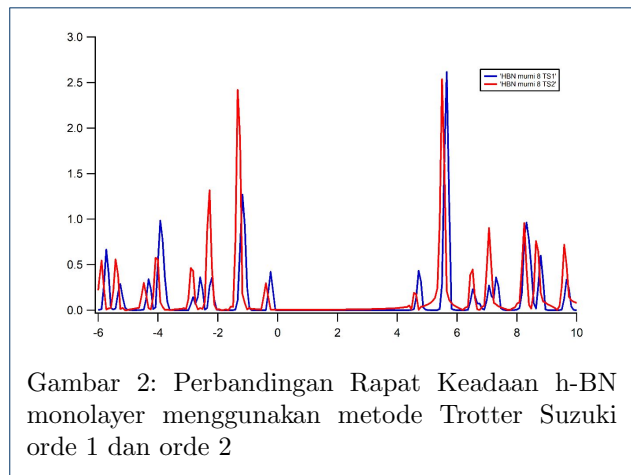
dimana  $E_g$  adalah *energy gap*/ selisih energi,  $\varepsilon_N$  adalah energi *onsite* nitrogen dan  $\varepsilon_B$  adalah energi *onsite* boron. Berdasarkan hasil perhitungan didapatkan nilai  $4.55 E/t$  sebagai celah energi sistem. Adanya celah energi disebabkan adanya perbedaan elektronegativitas di antara atom dalam satu unit



Gambar 1: Flowchart kalkulasi rapat keadaan h-BN menggunakan metode Trotter-Suzuki orde dua

sel [22]. Suatu grafik rapat keadaan terdapat puncak rapat keadaan yang juga dikenal sebagai singularitas Van Hove [3]. Keadaan puncak ini muncul dikarenakan adanya flat band oleh orbital  $p_z$  boron dan nitrogen sepanjang garis M-K di zona Brillouin.

Hasil rapat keadaan menggunakan metode Trotter Suzuki orde 1 yang dijadikan perbandingan merupakan hasil penggunaan metode Trotter Suzuki dengan mendekomposisi matriks menjadi blok-blok matriks kecil. Hal ini mempersingkat dalam penulisan matriks karna tidak perlu untuk menuliskan matriks Hamiltonian secara keseluruhan. Idanya yaitu hanya menuliskan blok matriks yang berulang agar menghitung sesuai perkalian yang seharusnya. Untuk hal itu, perlu pendalaman lebih ke matriks



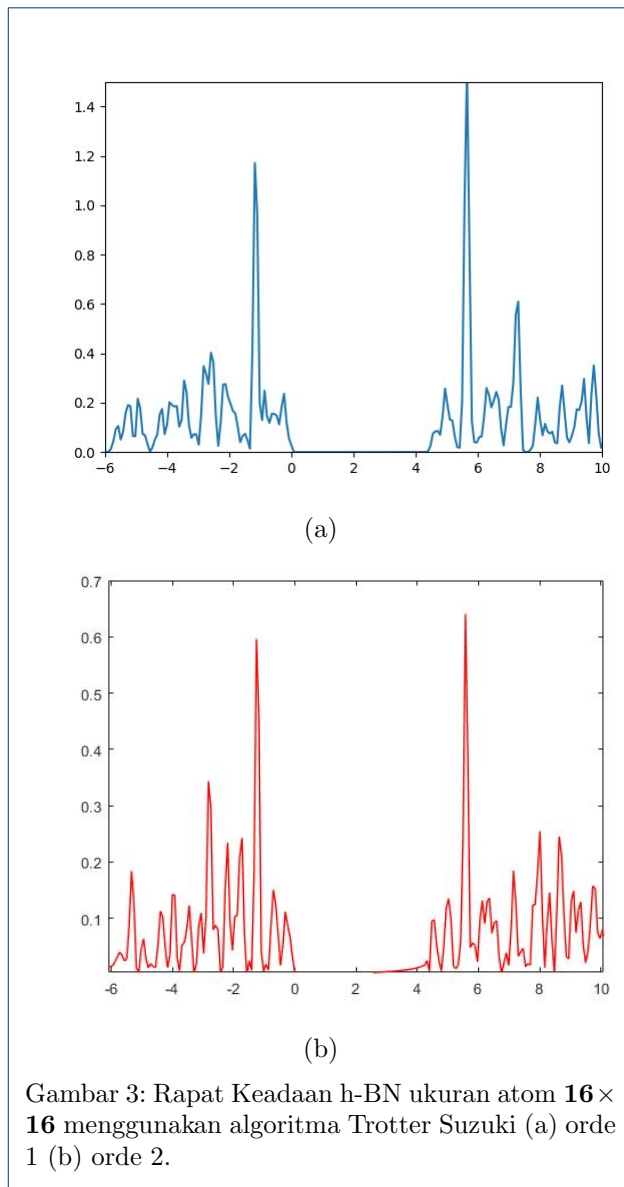
Hamiltonian yang digunakan agar dapat menemukan pola blok matriks berulang yang ada pada sistem.

Penggunaan metode Trotter Suzuki dengan dekomposisi matriks segitiga atas dan segitiga bawah kemudian dapat menjadi opsi. Dengan mengetahui jika matriks Hamiltonian merupakan matriks simetri dan uniter, matriks tidak perlu dicari pola blok matriksnya untuk langkah perhitungan. Cukup dengan langsung mendekomposisi matriks Hamiltonian tersebut menjadi matriks segitiga atas dan matriks segitiga bawah. Hal ini dikarenakan pada matriks upper atau lower terdapat sifat nilpotent, yaitu bila matriks tersebut dilakukan perkalian berkali-kali terhadap dirinya akan menghasilkan nilai 0. Pada kasus nilpotent, matriks eksponensial dapat dihitung dari ekspansi deret yang finit. Dengan kata lain matriks tersebut adalah matriks polinomial yang mana dapat dihitung secara efisien.

Oleh karena itu, perbandingan hasil rapat keadaan untuk metode Trotter Suzuki orde 1 dan orde 2 pada ukuran atom  $16 \times 16$  dan  $32 \times 32$  ditampilkan pada gambar 3, gambar 4 dan gambar 5.

Perhitungan Trotter Suzuki orde 1 menggunakan dekomposisi blok matriks dan dijalankan dengan bahasa pemrograman C++ dan python, sedangkan perhitungan Trotter Suzuki orde 2 ditampilkan dengan menggunakan dekomposisi *upper* dan *lower* matriks dan dijalankan dengan bahasa pemrograman MATLAB. Beberapa nilai input mendasar yang diberikan adalah jumlah atom, nilai diskrit pertambahan waktu ( $dt$ ), banyak cacah waktu ( $nstep$ ), serta parameter dasar dari h-BN ( $a, b$ , dan  $t$ ). Gambar 3, gambar 4 dan gambar 5 memiliki input sama berupa  $dt = 0.02$ ,  $nstep = 4000$ , nilai onsite energi nitrogen = 4.5, onsite energi boron = 0, dan hopping parameter = 2.55.

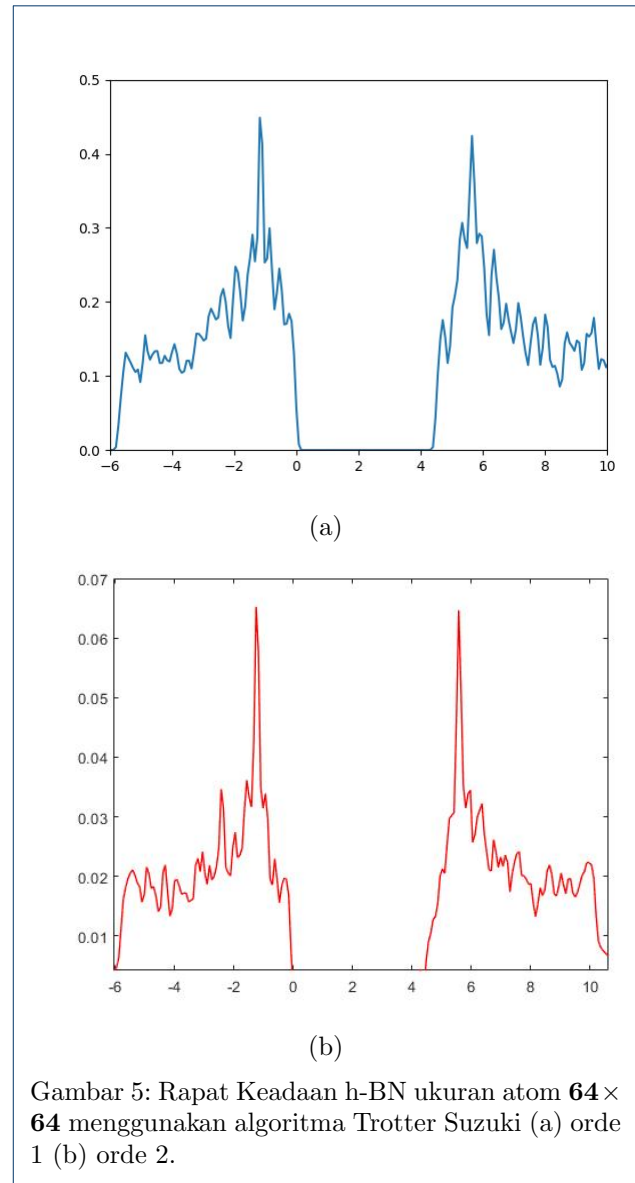
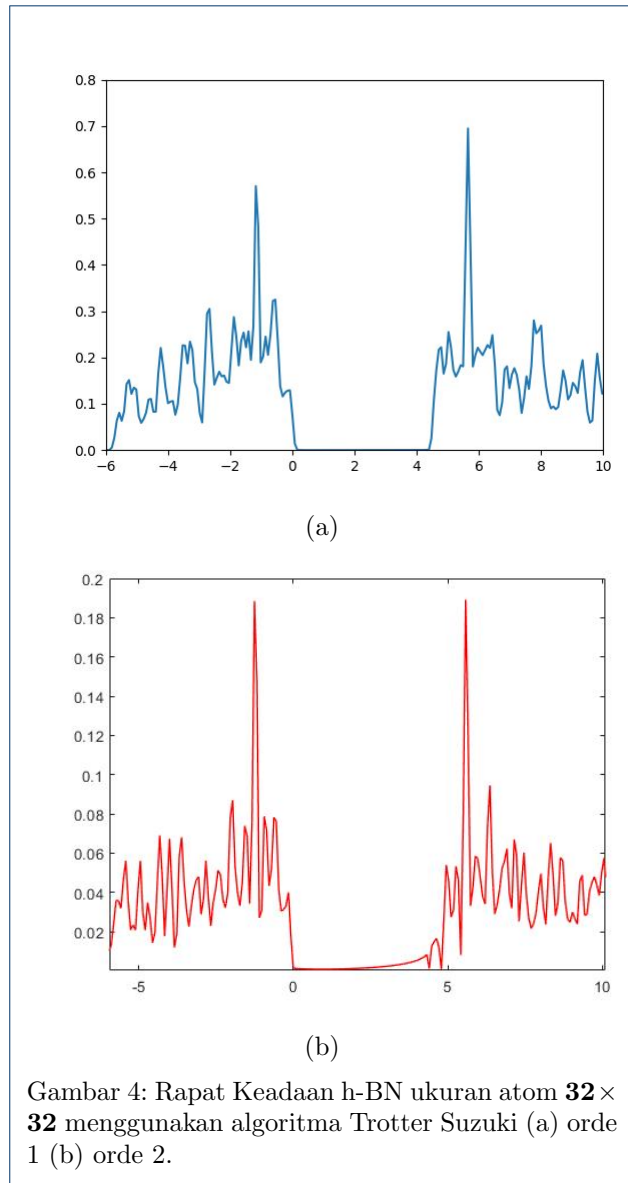
Secara keseluruhan, dapat dilihat bahwa hasil Trotter Suzuki orde 1 dan Trotter Suzuki orde 2 berada



dalam pola yang sama, menandakan bahwa pekerjaan yang telah dikerjakan adalah benar untuk rapat keadaan h-BN. Selanjutnya yang perlu diperhatikan, hasil Trotter Suzuki orde 2 memiliki grafik naik turun yang lebih curam daripada hasil Trotter Suzuki orde 1, hal ini menandakan bahwa orde 2 memiliki koreksi yang lebih tinggi daripada orde 1. Singularitas Van Hove dari hasil orde 2 juga lebih nampak daripada singularitas dari hasil orde 1, hal ini menyatakan bahwa hasil orde 2 adalah lebih teliti daripada hasil orde 1.

Pemaparan perbandingan antara dua grafik tersebut membuktikan bahwa hasil metode Trotter Suzuki orde 2 memiliki tingkat ketelitian yang lebih tinggi daripada hasil metode Trotter Suzuki orde 1. Dalam rangka





menciptakan grafik yang lebih halus, maka dapat dilakukan dengan memberikan nilai input yang lebih besar, baik itu jumlah atom, jumlah cacah waktu, atau membuat diskrit pertambahan waktu menjadi lebih kecil.

#### 4 KESIMPULAN

Berdasarkan hasil perhitungan rapat keadaan h-BN monolayer yang didapat disimpulkan bahwa menggunakan Trotter Suzuki orde 2 mempengaruhi terhadap akurasi dan efisiensi hasil perhitungan sistem h-BN monolayer. Dengan menggunakan koreksi orde dua didapatkan hasil yang lebih baik, namun dengan mengorbankan biaya komputasi yang lebih besar.

#### PENULIS

- 1 Abdurrahman Al-Faruq  
Dari :  
(1) Departemen Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Gadjah Mada
- 2 Pekik Nurwantoro  
Dari :  
(1) Departemen Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Gadjah Mada



Jurnal Fisika Indonesia, its website and the articles published are licensed under a [Creative Commons Attribution-ShareAlike 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/). © Departemen of Physics Universitas Gadjah Mada.

**Author details**

<sup>1</sup> Departemen Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta, Indonesia. <sup>2</sup> Departemen Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta, Indonesia.

**Pustaka**

1. Wittek P, Cucchiatti FM. A second-order distributed Trotter–Suzuki solver with a hybrid CPU–GPU kernel. *Computer Physics Communications*. 2013;184(4):1165-71.
2. Octaviany DC. Penyelesaian persamaan schrodinger gayut waktu dengan metode trotter-suzuki orde tinggi. Universitas Gadjah Mada; 2021.
3. Aquino T. Efek ketidakaturan terhadap sifat elektronik graphene monolayer: kajian numerik metode rambatan waktu Trotter-Suzuki. Universitas Gadjah Mada; 2018.
4. Zhang W, Lu WC, Zhang HX, Ho K, Wang C. Tight-binding calculation studies of vacancy and adatom defects in graphene. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2016;28(11):115001.
5. Jacobson N, Farmer S, Moore A, Sayir H. High Temperature Oxidation Behavior of Boron Nitride Part I: Monolithic BN. *J Am Ceram Soc*. 1999;82(2):393-8.
6. Shah K, Shah M. Principles of Raman Scattering in Carbon Nanotubes. IGI Global; 2014.
7. Hams A, De Raedt H. Fast algorithm for finding the eigenvalue distribution of very large matrices. *Physical Review E*. 2000;62(3):4365.
8. Wehling T, Yuan S, Lichtenstein A, Geim A, Katsnelson M. Resonant scattering by realistic impurities in graphene. *Physical review letters*. 2010;105(5):056802.
9. Ashhadi M, Hadavi M, Sarri Z. Electronic transport properties and first-principles study of graphene/h-BN and h-BN bilayers. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2017;87:312-6.
10. Blanes S, Casas F, Murua A. Error analysis of splitting methods for the time dependent Schrödinger equation. *SIAM Journal on Scientific Computing*. 2011;33(4):1525-48.
11. Suzuki M. Generalized Trotter's formula and systematic approximants of exponential operators and inner derivations with applications to many-body problems. *Communications in Mathematical Physics*. 1976;51(2):183-90.
12. Hatano N, Suzuki M. Finding exponential product formulas of higher orders. In: *Quantum annealing and other optimization methods*. Springer; 2005. p. 37-68.
13. De Raedt H. Product formula algorithms for solving the time dependent Schrödinger equation. *Computer Physics Reports*. 1987;7(1):1-72.
14. Suzuki M. Fractal decomposition of exponential operators with applications to many-body theories and Monte Carlo simulations. *Physics Letters A*. 1990;146(6):319-23.
15. Suzuki M. Mathematical basis of computational statistical physics and quantum analysis. *Computer physics communications*. 2000;127(1):32-6.
16. Hummel RE, Hummel RE. Electrical properties of polymers, ceramics, dielectrics, and amorphous materials. *Electronic properties of materials*. 2011:181-211.
17. Martin RM. *Electronic structure: basic theory and practical methods*. Cambridge university press; 2020.
18. van Veen E. *Large-Scale Tight-Binding Simulations of Two-Dimensional Materials and Self-Similar Systems*. [S]:[Sn]; 2019.
19. Brunton SL, Kutz JN. *Data-driven science and engineering: Machine learning, dynamical systems, and control*. Cambridge University Press; 2022.
20. WN CI. PERANAN VAKANSI ATOM PADA RAPAT KEADAAN (DOS) h-BN MONOLAYER MENGGUNAKAN METODE RAMBATAN WAKTU IKATAN KUAT TROTTER-SUZUKI. Universitas Gadjah Mada; 2021.
21. Ribeiro RM, Peres NM. Stability of boron nitride bilayers: Ground-state energies, interlayer distances, and tight-binding description. *Physical Review B*. 2011;83(23):235312.
22. Sławińska J, Zasada I, Klusek Z. Energy gap tuning in graphene on hexagonal boron nitride bilayer system. *Physical Review B*. 2010;81(15):155433.