

## DAFTAR ISI

PRAKATA	i
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xi
BAB I PENDAHULUAN	xi
I.1 Latar Belakang	xi
I.2 Tujuan Penelitian	xi
I.3 Manfaat Penelitian	xi
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	xi
II.1 Tinjauan Pustaka	xi
II.1.1 Penelitian material dua dimensi logam transisi dikalkogen	xi
II.1.2 Teknesium sulfida	xi
II.1.3 Peranan dopan nonlogam	xi
II.1.4 Stabilitas termodinamika dan sifat elektronik TcS <sub>2</sub>	xi
II.1.5 Penggunaan metode komputasi <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	xi
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	xi
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	xi
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	xi
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	xi
II.2.4 Perumusan hipotesis 4	xi
II.2.5 Rancangan penelitian	xi
BAB III METODE PENELITIAN	xi
III.1 Peralatan Penelitian	xi
III.1.1 Perangkat keras	xi
III.1.2 Perangkat lunak	xi
III.2 Model Material	xi
III.3 Lokasi Penelitian	xi
III.4 Prosedur Penelitian	xi
III.4.1 Optimasi geometri	xi
III.4.2 Perhitungan struktur elektronik	xi
III.4.3 Perhitungan nilai pita valensi dan konduksi maksimum	xi
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	xi
IV.1 Sifat Geometri dan Elektronik TcS <sub>2</sub> Murni	xi
IV.2 Energi Pembentukan TcS <sub>2</sub> yang Telah Terdoping	xi
IV.3 Geometri dan Sifat Elektronik TcS <sub>2</sub> Terdoping	xi
IV.3.1 Geometri dan sifat elektronik dari X@S	xi
IV.3.2 Geometri dan sifat elektronik dari X@Tc	xi

IV.4	Perubahan Sifat Elektronik TcS <sub>2</sub> Murni setelah Terdoping Atom Nonlogam	xi
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN	xi
V.1	Kesimpulan	xi
V.2	Saran	xi
	DAFTAR PUSTAKA	xi
	LAMPIRAN	xi

## DAFTAR GAMBAR

Gambar II.1.	Unit sel relaksasi TcS <sub>2</sub>	xi
Gambar II.2.	Pengamatan orbital yang berkontribusi pada material TcS <sub>2</sub> (Abdulsalam dan Joubert, 2016)	xi
Gambar II.3.	Tampilan perhitungan DOS untuk menentukan sifat elektronik material	xi
Gambar III.1	Posisi awal dopan dalam ekspansi <i>supercell</i> TcS <sub>2</sub> 1 x 2 x 2	xi
Gambar IV.1	Struktur kristal dari TcS <sub>2</sub> dan posisi ikatan Tc-S yang akan diamati	xi
Gambar IV.2	(a) TDOS dan (b) PDOS TcS <sub>2</sub> murni	xi
Gambar IV.3	Panjang ikatan yang diamati pada doping substitusi di situs S	xi
Gambar IV.4	(a) TDOS dan (b) PDOS dari TcS <sub>2</sub> terdoping atom F, Cl, Br dan I	xi
Gambar IV.5	(a) TDOS dan (b) PDOS dari TcS <sub>2</sub> terdoping atom H, B dan C	xi
Gambar IV.6	(a) TDOS dan (b) PDOS dari TcS <sub>2</sub> terdoping atom N, O, dan Se	xi
Gambar IV.7	Panjang ikatan yang diamati pada doping substitusi di situs Tc	xi
Gambar IV.8	(a) TDOS dan (b) PDOS dari TcS <sub>2</sub> terdoping atom H, B dan C	xi
Gambar IV.9	(a) TDOS dan (b) PDOS dari TcS <sub>2</sub> terdoping atom F, Cl, Br dan I	xi
Gambar IV.10	(a) TDOS dan (b) PDOS dari TcS <sub>2</sub> terdoping atom N, O, dan Se	xi

## DAFTAR TABEL

Tabel II.1	Sifat elektronik dari beberapa TMDC (Han <i>et al.</i> , 2015)	xi
Tabel IV.1	Perhitungan energi pembentukan substitusi di S dan Tc (eV)	xi
Tabel IV.2	Perhitungan panjang ikatan dari TcS <sub>2</sub> murni dan substitusi dopan nonlogam di situs S	xi
Tabel IV.3	Perhitungan panjang ikatan dari TcS <sub>2</sub> murni dan substitusi dopan nonlogam di situs Tc	xi
Tabel IV.4	Nilai E <sub>g</sub> serta posisi CBM dan VBM untuk TcS <sub>2</sub> didoping atom nonlogam (eV)	xi

## DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Diagram Proses <i>Running</i> Penelitian	xi
Lampiran 2. Unit Sel	xi
Lampiran 3. Perubahan Panjang Ikatan Doping Substitusi Atom Nonlogam <b>Error!</b> <b>Bookmark not defined.</b>	
Lampiran 4. TDOS Setiap Sistem	xi
Lampiran 5. PDOS Setiap Sistem	xi
Lampiran 6. File Input <i>Running</i> TcS <sub>2</sub> Murni	xi
Lampiran 7. File Input <i>Running</i> Doping TcS <sub>2</sub>	xi
Lampiran 8. File Input Masing- masing Atom	xi