



**PENGARUH INTERSTISIAL HIDROGEN PADA SISTEM MONOVACANCY MATERIAL INTAN:  
KOMPUTASI BERBASIS DENSITY  
FUNCTIONAL THEORY**

Nurul Fajariah, Sholihun, S.Si, M.Si, Ph.D.Sc. dan Dr.Sc. Ari Dwi Nugraheni, S.Si., M.Si.

Universitas Gadjah Mada, 2023 | Diunduh dari <http://etd.repository.ugm.ac.id/>

|  |      |
|--|------|
| COVER.....                                       | i    |
| HALAMAN PENGESAHAN .....                         | ii   |
| PERNYATAAN .....                                 | iii  |
| KATA PENGANTAR .....                             | iv   |
| DAFTAR ISI.....                                  | v    |
| DAFTAR GAMBAR.....                               | vii  |
| DAFTAR TABEL .....                               | viii |
| INTISARI.....                                    | ix   |
| <i>ABSTRACT</i> .....                            | x    |
| BAB I PENDAHULUAN .....                          | 1    |
| 1.1 Latar Belakang .....                         | 1    |
| 1.2 Hipotesis.....                               | 4    |
| 1.3 Rumusan Masalah .....                        | 5    |
| 1.4 Batasan Masalah.....                         | 5    |
| 1.5 Tujuan Penelitian.....                       | 5    |
| 1.6 Manfaat Penelitian .....                     | 5    |
| BAB II TINJAUAN PUSTAKA .....                    | 6    |
| BAB III LANDASAN TEORI .....                     | 10   |
| 3.1 Sistem Elektron Banyak.....                  | 10   |
| 3.2 Pendekatan Born Oppenheimer.....             | 11   |
| 3.3 Pendekatan Hartree-Fock.....                 | 12   |
| 3.4 <i>Density Functional Theory</i> (DFT) ..... | 14   |
| 3.4.1 Teorema Hohenberg-Kohn.....                | 14   |
| 3.4.2 Persamaan Kohn Sham .....                  | 17   |
| 3.5 Fungsional Pertukaran-Korelasi.....          | 20   |
| 3.6 Intan.....                                   | 22   |
| 3.7 Hidrogen.....                                | 24   |
| 3.8 Isolator, Semikonduktor dan Konduktor.....   | 24   |
| 3.9 <i>Defect</i> Pada Kristal.....              | 26   |
| 3.10 Simetri dan <i>Point Grup</i> .....         | 28   |
| 3.11 Struktur Pita .....                         | 32   |
| BAB IV METODOLOGI PENELITIAN.....                | 35   |
| 4.1 Waktu dan Tempat Penelitian.....             | 35   |
| 4.2 Perangkat Keras dan Lunak .....              | 35   |
| 4.3 Tahapan Penelitian .....                     | 36   |
| 4.3.1 Diagram Alir Penelitian.....               | 36   |



**4.3. PENGARUH INTERSTISIAL HIDROGEN PADA SISTEM MONOVACANCY MATERIAL INTAN:  
KOMPUTASI BERBASIS DENSITY  
FUNCTIONAL THEORY**

4.3.3 Optimasi dan Konstruksi Unit Sel Intan  
Nopriani, S.Si, M.Si, Ph.D, Saran Dr.Sc. Ari Dwi Nugraheni, S.Si., M.Si..... 39

Universitas Gadjah Mada, 2023 | Diunduh dari <http://etd.repository.ugm.ac.id/>

|   |           |
|---|-----------|
| 4.3.4 Konstruksi Sistem .....               | 41        |
| 4.3.5 Menghitung Volume Atom Tetangga ..... | 44        |
| 4.3.6 Menghitung Energi Formasi .....       | 46        |
| 4.3.7 Menghitung Energi Absorpsi .....      | 46        |
| 4.3.8 Menghitung Energi Gap .....           | 46        |
| <b>BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN .....</b>     | <b>48</b> |
| 5.1 Geometri Teroptimasi.....               | 48        |
| 5.2 Struktur Geometri.....                  | 50        |
| 5.3 Struktur Elektronik Sistem.....         | 56        |
| <b>BAB VI PENUTUP .....</b>                 | <b>62</b> |
| 6.1 Kesimpulan .....                        | 62        |
| 6.2 Saran.....                              | 62        |
| <b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>                 | <b>63</b> |