



DAFTAR ISI

HALAMAN SAMPUL	i
HALAMAN JUDUL.....	ii
SURAT PERNYATAAN.....	iii
MOTTO	iv
PRAKATA.....	v
DAFTAR ISI.....	vii
DAFTAR TABEL.....	ix
DAFTAR GAMBAR	x
ABSTRACT	xiii
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1. Latar belakang masalah.....	1
1.2. Rumusan Masalah	4
1.3. Batasan Masalah.....	4
1.4. Tujuan Penelitian.....	4
1.5. Manfaat Penelitian.....	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	6
BAB III LANDASAN TEORI.....	10
3.1. Sistem banyak partikel	12
3.1.1. Pendekatan Born-Oppenheimer.....	13
3.1.2. Metode Variasi.....	14
3.1.3. Pendekatan Hartree-Fock.....	14
3.2. <i>Density Functional Theory</i> (DFT).....	17
3.2.1. Teorema Hohenberg-Kohn	17
3.2.2. Persamaan Kohn-Sham.....	20
3.3. Galium Nitrida (GaN).....	22
3.4. Struktur Elektronik Kristal	23



3.5. Defective.....	24
BAB IV METODE PENELITIAN.....	28
4.1. Waktu dan Tempat Penelitian	28
4.2. Tahapan Penelitian	29
4.3. Sarana Penelitian	34
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN.....	35
5.1. Variasi k-point dan cut-off	35
5.2. Optimasi Kisi.....	36
5.3. Konstruksi g-GaN	37
5.4. Energi Formasi	50
5.5. Density of States (DOS).....	52
5.6. Simetri Grup dan Reaksi Koordinat.....	25
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN	55
DAFTAR PUSTAKA	57