

DAFTAR ISI

SAMPUL	i
HALAMAN JUDUL SKRIPSI.....	ii
HALAMAN PENGESAHAN.....	iii
PERNYATAAN.....	iv
KATA PENGANTAR.....	v
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL.....	xii
INTI SARI.....	xiii
ABSTRACT.....	xiv
BAB I	1
PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Batasan Masalah.....	3
1.4 Tujuan Penelitian.....	4
1.5 Manfaat Penelitian	4
1.6 Sistematika Penulisan	4
1.7 Hipotesa.....	5
BAB II.....	7
TINJAUAN PUSTAKA.....	7
BAB III	11
LANDASAN TEORI.....	11
3.1 Sistem Banyak Partikel	11
3.2 Aproksimasi Born-Oppenheimer	13
3.3 Aproksimasi Hartree-Fock.....	14
3.4 Density Functional Theory (DFT)	16

3.4.1	Teorema Hohenberg-Kohn	17
3.4.2	Persamaan Kohn-Sham	19
3.5	Fungsi Pertukaran dan Korelasi	22
3.6	Gelombang Datar dan Zona Brillouin.....	24
3.7	Silicon Carbide.....	25
3.8	Defective (<i>Vacancy</i>)	27
3.9	Energi Formasi	28
3.10	Energi Disosiasi	28
3.11	Simetri dan Point Grup	28
BAB IV		31
METODE PENELITIAN		31
4.1	Waktu dan Tempat Penelitian.....	31
4.2	Perangkat Penelitian.....	31
4.3	Prosedur Penelitian.....	32
4.3.1	Diagram Alir Penelitian.....	32
4.3.2	Alur Komputasi Sistem <i>Multivacancies</i>	33
4.3.3	Konstruksi dan Optimasi Sistem Unit Sel.....	33
4.3.4	Konstruksi dan Optimasi Sistem Super Sel	35
4.3.5	<i>Multivacancies</i>	36
4.3.6	Perhitungan Energi Formasi.....	38
4.3.7	Perhitungan Energi Disosiasi	38
BAB V.....		40
HASIL DAN PEMBAHASAN		40
5.1	Geometri Teroptimasi dan Simetri	40
5.2	Energi Formasi	52
5.3	Energi Disosiasi	54

BAB VI	57
KESIMPULAN DAN SARAN.....	57
6.1 Kesimpulan	57
6.2 Saran.....	57
DAFTAR PUSTAKA.....	58

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1. 1 Material SiC 2D	1
Gambar 2. 1 Konfigurasi defect dari monolayer SiC. : (a) BC, (b) PSi, (c) NC, (d) AlSi, (e) CSi, (f) SiC, (g) VC, and (h) VSi. Complex defects: (i) VSi-VC, (j) SiC-VC, (k) CSi-VSi, (l) CSi-VC, (m) PSi-VC, (n) PSi-VSi, (o) BC-VC, (p) BSi-VC, (q) NC-VC, (r) NC-VSi, (s) AlSi-VC, and (t) AlSi-Vsi (Singh dkk., 2023).	9
Gambar 3. 1 Diagram Alir Self-Consistent Iterative pada persamaan Kohn-Sham	21
Gambar 3. 2 First Brillouin Zone dari struktur material honeycomb (Koukaras dkk., 2015)	25
Gambar 3. 3 Struktur atom SiC : (a) 3D 3C-SiC (Almashhadani, 2014), (b) 2D SiC (monolayer)	26
Gambar 3. 4 Zona Brillouin 3C-SiC Face-Centered Cubic (FCC) (Meng dkk., 2019)	27
Gambar 4. 1 Diagram Alir Penelitian.....	33
Gambar 4. 2 Unit Sel SiC.....	34
Gambar 4. 3 Grafik Hasil Kalkulasi BM-EOS.....	35
Gambar 4. 4 Super Sel SiC dengan Perbesaran $6 \times 6 \times 1$	36
Gambar 4. 5 Skema konfigurasi Multivacancies : (a) Vacancy Si, (b) Vacancy C, (c) Vacancy SiC, (d) Vacancy Si ₂ C ₂ , (e) Vacancy Si ₃ C ₃ , (f) Vacancy Si ₄ C ₄ , (g) Vacancy Si ₅ C ₅ , (h) Vacancy Si ₆ C ₆ , (i) Vacancy Si ₇ C ₇	37
Gambar 5. 1 Konfigurasi monovacancy : (a) Vacancy Si unrelaxed, (b) Vacancy C unrelaxed, (c) Vacancy Si relaxed, (d) Vacancy C relaxed	42
Gambar 5. 2 Identitas Simetri : (a) D _{3h} , dan (b) C _{2v}	43
Gambar 5. 3 Simetri Vacancy Si	43
Gambar 5. 4 Simetri Vacancy C	44
Gambar 5. 5 Konfigurasi Vacancy SiC : (a) Sistem unrelaxed, (b) Sistem relaxed	45

Gambar 5. 6 Konfigurasi Vacancy Si ₂ C ₂ ($V_{Si_2C_2}$): (a) Sistem unrelaxed, (b) Sistem relaxed simetri Cs.....	46
Gambar 5. 7 Konfigurasi Vacancy Si ₃ C ₃ ($V_{Si_3C_3}$): (a) Sistem unrelaxed, (b) Sistem relaxed	47
Gambar 5. 8 Konfigurasi Vacancy Si ₄ C ₄ ($V_{Si_4C_4}$): (a) Sistem unrelaxed, (b) Sistem relaxed simetri Cs.....	48
Gambar 5. 9 Konfigurasi Vacancy Si ₅ C ₅ ($V_{Si_5C_5}$): (a) Sistem unrelaxed, (b) Sistem relaxed	49
Gambar 5. 10 Konfigurasi Vacancy Si ₆ C ₆ ($V_{Si_6C_6}$): (a) Sistem unrelaxed, (b) Sistem relaxed simetri Cs.....	50
Gambar 5. 11 Konfigurasi Vacancy Si ₇ C ₇ ($V_{Si_7C_7}$): (a) Sistem unrelaxed, (b) Sistem relaxed simetri Cs.....	51
Gambar 5. 12 Energi Formasi vs Vacancy dari Vacancy SiC, Vacancy Si ₂ C ₂ , Vacancy Si ₃ C ₃ , Vacancy Si ₄ C ₄ , Vacancy Si ₅ C ₅ , Vacancy Si ₆ C ₆ , dan Vacancy Si ₇ C ₇	53
Gambar 5. 13 Energi Disosiasi vs Vacancy dari Vacancy SiC, Vacancy Si ₂ C ₂ , Vacancy Si ₃ C ₃ , Vacancy Si ₄ C ₄ , Vacancy Si ₅ C ₅ , Vacancy Si ₆ C ₆ , dan Vacancy Si ₇ C ₇	55

DAFTAR TABEL

Tabel 3. 1 Operasi Simetri beserta Elemen dan Simbol.....	29
Tabel 3. 2 Identitas Simetri dan Poin Grup Kristal (Powell, 2010)	30
Tabel 4. 1 Parameter dalam Kalkulasi.....	31
Tabel 5. 1 Jumlah Dangling Bond.....	40
Tabel 5. 2 Jarak antar atom dari sistem terelaksasi konfigurasi ber- <i>vacancy</i>	41
Tabel 5. 3 Nilai Energi Formasi	53
Tabel 5. 4 Nilai Energi Disosiasi.....	55