UNIVERSITAS
GADJAH MADA
KAJIAN STABILITAS KONFIGURASI VACANCY, SUBSTITUSI, INTERCHANGE, DAN STONE-WALES PADA MONOLAYER SNGE:
KOMPUTASI DENSITY FUNCTIONAL THEORY
Putri Awalia Shabrina, Prof. Sholihun, S.Si., M.Sc., Ph.D.Sc
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL i
HALAMAN PENGESAHAN iii
SURAT PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI iv
MOTTO DAN PERSEMBAHAN v
PRAKATA vi
DAFTAR ISI viii
DAFTAR GAMBAR xi
DAFTAR TABEL xiv
INTISARI xvi
ABSTRACT xvii
BAB I 18
PENDAHULUAN 18
1.1 Latar Belakang 18
1.2 Rumusan Masalah 2
1.3 Batasan Masalah 2
1.4 Tujuan Penelitian 2
1.5 Manfaat Penelitian 3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA 4
BAB III 13
LANDASAN TEORI 13
3.1 Persamaan Banyak Partikel 13
3.2 Pendekatan Born-Oppenheimer 14
3.3 Pendekatan Hartree-Fock 15
3.4 Density functional theory (DFT) 16
3.4.1 Teorema Hohenberg-Kohn 16
3.4.2 Persamaan Kohn-Sham 18
3.4.3 Energi total dalam DFT 19
3.5 Stanum Germanium (SnGe) 20
3.6 Struktur Kristal 22
3.7 Simetri dan Poin Grup 25
3.8 Defect Material 26

KAJIAN STABILITAS KONFIGURASI VACANCY, SUBSTITUSI, INTERCHANGE, DAN STONE-WALES PADA MONOLAYER SNGE:
KOMPUTASI DENSITY FUNCTIONAL THEORY
Putri Awalia Shabrina, Prof. Sholihun, S.Si., M.Sc., Ph.D.Sc
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

3.8.1 *Defect Vacancy* 27
3.8.2 Substitusi Atom 28
3.8.3 *Defect Interchange* 30
3.8.4 *Defect* Stone-Wales 32
BAB IV 35
METODOLOGI PENELITIAN 35
4.1 Waktu dan Tempat Penelitian 35
4.2 Alat dan Bahan Penelitian 35
4.3 Metode Penelitian 37
4.3.1 Alur penelitian 37
4.3.2 Diagram alir kalkulasi SCF 38
4.4 Prosedur Penelitian 39
4.4.1 Studi literatur dan pembuatan rumusan masalah 39
4.4.2 Optimasi kisi 40
4.4.3 Kalkulasi unit sel 43
4.4.4 Kalkulasi *supercell* 44
4.4.5 Konstruksi *defect* 45
4.4.6 Perhitungan energi formasi 45
BAB V HASIL PENELITIAN 47
HASIL PENELITIAN 47
5.1 Optimasi Kisi 47
5.2 Hasil Grafik *Partial Density of States* (PDOS) dan *Band-Structure* Unit Sel 48
5.3 Konfigurasi Optimal SnGe 50
5.4 Konstruksi Struktur *Defect* 52
5.3.1 Konstruksi *defect vacancy* 53
5.3.2 Konstruksi *defect* substitusi 56
5.3.3 Konstruksi *defect interchange* 57
5.3.4 Konstruksi *defect* Stone-Wales 59
5.5 Reaksi Koordinat 60
5.6 Konfigurasi Struktural *Defect* 65
5.5.1 Konfigurasi *defect vacancy* 66
5.5.2 Konfigurasi *defect* substitusi 75
5.5.3 Konfigurasi *defect interchange* 78
5.5.4 Konfigurasi *defect* Stone-Wales 79
5.7 Simetri Grup 81
5.8 Energi Formasi 85
5.9 *Partial Density of States* (PDOS) 87
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN 98
6.1 Kesimpulan 98

KAJIAN STABILITAS KONFIGURASI VACANCY, SUBSTITUSI, INTERCHANGE, DAN STONE-WALES PADA MONOLAYER SNGE:
KOMPUTASI DENSITY FUNCTIONAL THEORY
Putri Awalia Shabrina, Prof. Sholihun, S.Si., M.Sc., Ph.D.Sc
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

6.2 Saran 99

DAFTAR PUSTAKA 101

LAMPIRAN..... 107