

DAFTAR ISI

SKRIPSI	I
HALAMAN PENGESAHAN	III
PERNYATAAN	IV
KATA PENGANTAR	V
DAFTAR ISI	VII
DAFTAR GAMBAR.....	IX
DAFTAR TABEL	X
INTISARI.....	XI
ABSTRACT.....	XII
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1. LATAR BELAKANG	1
1.2. RUMUSAN MASALAH	3
1.3. BATASAN MASALAH	4
1.4. TUJUAN PENELITIAN	4
1.5. MANFAAT PENELITIAN.....	4
1.6. SISTEMATIKA PENULISAN.....	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	6
BAB III LANDASAN TEORI.....	8
3.1. SISTEM BANYAK PARTIKEL.....	8
3.2. APROKSIMASI BORN-OPPENHEIMER.....	11
3.3. APROKSIMASI HARTREE-FOCK.....	11
3.4. DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT)	14
3.5. TEOREMA HOHENBERG-KOHN	15
3.6. PERSAMAAN KOHN-SHAM	18
3.7. FUNGSI PERTUKARAN DAN KORELASI.....	23

3.8. PSEUDOPOTENSIAL	24
3.9. GELOMBANG DATAR DAN ZONA BRILLOUIN.....	25
3.10. THALLIUM PHOSPHIDE (TLP).....	28
BAB IV METODE PENELITIAN	32
4.1. WAKTU DAN TEMPAT PENELITIAN	32
4.2. ALAT DAN BAHAN PENELITIAN	32
4.3. SKEMA PENELITIAN.....	33
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN.....	41
5.1. OPTIMASI KISI.....	42
5.2. STABILITAS STRUKTURAL	43
5.3. SIFAT-SIFAT ELEKTRONIK.....	48
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN.....	58
6.1. KESIMPULAN	58
6.2. SARAN.....	59
DAFTAR PUSTAKA.....	60