

DAFTAR ISI

SKRIPSI.....	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN.....	iii
KATA PENGANTAR	iv
DAFTAR ISI.....	v
DAFTAR TABEL.....	vii
DAFTAR GAMBAR	viii
INTISARI.....	x
ABSTRACT.....	xi
BAB I 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
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	6
BAB III LANDASAN TEORI.....	8
3.1 Dasar Pemikiran DFT.....	8
3.2 Pendekatan Born-Oppenheimer	11
3.3 Pendekatan Hartree-Fock	12
3.4 Density Functional Theory (DFT).....	14
3.5 Fungsional Pertukaran-Korelasi (Exchange-Correlation)	20
3.6 Bagan Alur Penyelesaian Kalkulasi dengan Metode DFT	24
3.7 <i>Spin-Polarized</i> DFT	26
3.8 Birch-Murnaghan equation of states (BM-EOS).....	29
3.9 Konstanta Kisi Optimum.....	30
3.10 Panjang Ikatan	31
3.11 Terminasi Hidrogen.....	32
3.12 Energi Adsorpsi	32

3.13 Momen Magnet	33
3.14 Stanene	35
BAB IV METODE PENELITIAN	38
4.1 Waktu dan Tempat Penelitian	38
4.2 Alat dan Bahan Penelitian	39
4.3 Skema Penelitian	40
4.4 Prosedur Penelitian	41
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN.....	47
5.1 Optimasi Kisi.....	47
5.2 Terminasi Hidrogen.....	50
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN	68
6.1 Kesimpulan.....	68
6.2 Saran	68
DAFTAR PUSTAKA	69