

DAFTAR ISI

Halaman Judul	ii
Halaman Pengesahan	iii
Halaman Pernyataan	iv
Halaman Persembahan	v
Halaman Motto	vi
PRAKATA	vii
DAFTAR ISI	viii
INTISARI	xii
ABSTRACT	xiii
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah	1
1.2 Perumusan Masalah	3
1.3 Batasan Masalah	3
1.4 Tujuan Penelitian	3
1.5 Manfaat Penelitian	4
II TINJAUAN PUSTAKA	5
III LANDASAN TEORI	10
3.1 Sistem Banyak Partikel	10
3.1.1 Pendekatan Born-Oppenheimer	12
3.1.2 Asas Variasi	13
3.1.3 Pendekatan Hartree-Fock	14
3.2 Density Functional Theory	16
3.2.1 Teorema Hohenberg-Kohn	17
3.2.2 Persamaan Kohn-Sham	19
3.2.3 Fungsional Pertukaran-Korelasi	21

3.3	Struktur Kristal	22
3.3.1	Kisi Bravais	23
3.3.2	Kisi Resiprokal	25
3.4	<i>Hexagonal Boron Nitride</i> (h-BN)	25
3.5	Energi Formasi	26
IV	METODOLOGI PENELITIAN	27
4.1	Waktu dan Tempat Penelitian	27
4.2	Tahapan Penelitian	27
4.3	Sarana Penelitian	31
V	Hasil dan Pembahasan	34
5.1	Optimasi Konstanta Kisi dan Konstruksi h-BN	34
5.2	Geometri Optimisasi	37
5.3	Energi Formasi	42
5.4	Struktur Elektronik	45
5.5	Simetri Grup Kristal	48
5.6	Jalur Reaksi	52
VI	Kesimpulan dan Saran	54
6.1	Kesimpulan	54
6.2	Saran	54
	DAFTAR PUSTAKA	56
	DAFTAR PUSTAKA	56
A	Lampiran Publikasi Paper	60
B	Lampiran Konferensi	67

DAFTAR TABEL

4.1	Spesifikasi HPC LIPI	31
5.1	Energi Formasi hasil perhitungan (E_f) dan referensi (E_f^*)	44
5.2	Tabel Karakteristik Grup Simetri D_{3h}	48
5.3	Tabel Karakteristik Grup Simetri C_{2v}	51