

DAFTAR ISI

Halaman Judul	ii
Halaman Pengesahan	iii
Halaman Pernyataan	iv
Halaman Persembahan	v
Halaman Motto	vi
PRAKATA	vii
INTISARI	xiv
ABSTRACT	xv
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 DASAR TEORI	9
3.1 Dasar-dasar Density Functional Theory	9
3.1.1 Pendekatan Born-Oppenheimer	10
3.1.2 Pendekatan Hartree-Fock	11
3.1.3 Teorema Hohenberg-Kohn	14
3.1.4 Persamaan Kohn-Sham	14
3.1.5 Fungsional Pertukaran-Korelasi	17
3.1.6 Ilustrasi Alur Penerapan Teori-teori DFT dalam Kalkulasi	20
3.2 Germanium	21
3.3 Germanene	22

3.4	<i>Defect</i>	22
3.5	Kalkulasi DFT	23
3.5.1	Program Phase0	23
3.6	Kestabilan Sistem	23
IV	Metode Penelitian	26
4.1	Waktu dan Tempat Penelitian	26
4.2	Sarana Penelitian	26
4.3	Metode Komputasi Berbasis DFT	27
4.4	Tahapan Kalkulasi	27
V	Hasil Dan Pembahasan	34
5.1	Sistem Germanene	34
5.1.1	Tinjauan terhadap Kisi yang Paling Optimum	34
5.1.2	Konstruksi Super Sel	35
5.1.3	Sistem <i>Buckling</i> pada Germanene	36
5.2	Struktur <i>Vacancies</i> pada Germanene	37
5.2.1	<i>Monovacancy</i>	37
5.2.2	<i>Divacancies</i>	39
5.3	Energi Formasi Sistem <i>Vacancy</i>	41
5.3.1	<i>Monovacancy</i>	41
5.3.2	<i>Divacancies</i>	42
5.4	Tinjauan terhadap Kestabilan Sistem <i>Vacancy</i>	42
5.4.1	<i>Monovacancy</i>	43
5.4.2	<i>Divacancies</i>	43
5.5	Distribusi Rapat Muatan	44
5.5.1	<i>Monovacancy</i>	45
5.5.2	<i>Divacancies</i>	45
5.6	Proses Difusi	46
5.6.1	MV_1	46
5.6.2	DV_1	47
5.6.3	DV_2	48
VI	KESIMPULAN DAN SARAN	50
6.1	Kesimpulan	50
6.2	Saran	51



DAFTAR PUSTAKA	52
A Perhitungan Struktur Pita	57
B Riwayat Publikasi	58
2.1 Materials Today	58
2.2 ICST 2018	76
2.3 UPIS	78