

DAFTAR ISI

Halaman Judul	i
Halaman Sampul	ii
Halaman Pengesahan	iii
Halaman Pernyataan	iv
Halaman Persembahan	v
Halaman Motto	vi
PRAKATA	vii
DAFTAR ISI	x
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR TABEL	xii
INTISARI	xiii
ABSTRACT	xiv
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah	1
1.2 Perumusan Masalah	3
1.3 Batasan Masalah	3
1.4 Tujuan Penelitian	4
1.5 Manfaat Penelitian	4
II TINJAUAN PUSTAKA	5
III LANDASAN TEORI	9
3.1 <i>Hexagonal Boron Nitride</i> (h-BN)	9
3.1.1 Struktur Ruang Kristal pada h-BN	10
3.1.2 Struktur Ruang Kisi Balik pada h-BN	10

3.2	Sistem Banyak Partikel	11
3.2.1	Pendekatan Born-Oppenheimer	14
3.2.2	Asas Variasi	15
3.2.3	Pendekatan Hartree-Fock	15
3.3	Density Functional Theory	17
3.3.1	Teorema Hohenberg-Kohn	17
3.3.2	Persamaan Kohn-Sham	19
3.3.3	Fungsional Pertukaran-Korelasi	21
3.3.4	Potensial Semu	22
IV	METODE PENELITIAN	24
4.1	Waktu dan Tempat Penelitian	24
4.2	Sarana Penelitian	24
4.3	Parameter Komputasi	25
4.4	Tahapan Penelitian	25
4.4.1	Studi Literatur	25
4.4.2	Perhitungan Komputasi	26
4.4.3	Analisis Data	31
4.4.4	Hasil dan Pembahasan	32
V	HASIL DAN PEMBAHASAN	33
5.1	Optimasi Konstanta Kisi	33
5.2	Konstruksi Unit Sel dan Super Sel	35
5.3	Geometri Optimasi h-BN	35
5.4	Geometri Optimasi <i>Monovacancy</i> h-BN	36
5.5	Adsorpsi Hidrogen dan H_2O pada <i>Monovacancy</i> h-BN	38
5.6	Energi Formasi	38
5.7	Energi Adsorpsi	40
5.8	Energi Relaksasi	41
VI	KESIMPULAN DAN SARAN	44
6.1	Kesimpulan	44
6.2	Saran	44
DAFTAR PUSTAKA		46

DAFTAR GAMBAR

2.1	Pemodelan interaksi atom-atom dalam suatu logam dengan atom H_2 (Zoulas dkk, 2006)	6
3.1	Hexagonal Boron Nitride. Atom Nitrogen dan Boron digambarkan dengan bola berwarna biru dan meerah muda	9
3.2	Struktur kristal dan <i>bravais lattice honeycomb</i> (Raza, 2012)	10
3.3	Kisi balik dari <i>monolayer</i> graphene, di mana tanda silang menunjukkan titik kisi balik, vektor b_1 dan b_2 merupakan vektor kisi primitif dan segi enam yang diarsir menunjukkan zona Brillouin pertama (Raza, 2012)	12
4.1	<i>Flow-chart</i> Proses Penelitian	25
4.2	<i>Self-Consistent Field</i> (SCF)	26
4.3	Input file dari unit vektor pada program PHASE	29
4.4	Kontruksi dari (a) V_B (b) V_N pada h-BN	30
4.5	Adsorpsi (a) hidrogen disekitar V_B (sistem $V_B - H$) (b) H_2O disekitar V_B V_N (sistem $V_B - H_2O$) (c) hidrogen disekitar V_N (sistem $V_N - H$) (d) H_2O disekitar V_N (sistem $V_N - H_2O$)	31
5.1	<i>Fitting</i> BM-EOS data hasil kalkulasi V-E h-BN	34
5.2	Geometri optimasi h-BN	36
5.3	Geometri relaksasi (a) <i>monovacancy</i> Nitrogen (V_N) dan (b) <i>monovacancy</i> Boron (V_B)	37
5.4	Optimasi struktur (a) h-BN- V_N -H, (b) h-BN- V_B -H, (c) h-BN- V_N -H ₂ O, and (d) h-BN- V_B -H ₂ O. Bola hijau adalah atom Hidrogen	39
5.5	Jalur reaksi (a) sistem h-BN- V_B -H dan (b) h-BN- V_B -H ₂ O	42

DAFTAR TABEL

5.1	Energi Formasi (E_f), Energi Adsorpsi (E_{ads}), dan Energi Relak-	
	sasi (E_{relak})	41