

DAFTAR ISI

PRAKATA	iv
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah	1
1.2 Perumusan Masalah	4
1.3 Batasan Masalah	4
1.4 Tujuan Penelitian	5
1.5 Manfaat Penelitian	5
II TINJAUAN PUSTAKA	6
III LANDASAN TEORI	11
3.1 Sistem Elektron Banyak	11
3.1.1 Pendekatan <i>Born Oppenheimer</i> (BO)	12
3.1.2 Pendekatan Hartree-Fock	13
3.2 <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	14
3.2.1 Teorema Hohenberg-Kohn	15
3.2.2 Persamaan Kohn-Sham	17
3.3 Fungsional Pertukaran dan Korelasi	19
3.4 Ruang Resiprokal	21
3.5 Potensial Semu	22
3.6 <i>Defect</i> Pada Kristal	23
3.6.1 <i>Defect vacancy</i>	24
3.6.2 <i>Defect</i> interstisial	25
3.6.3 <i>Defect</i> substitusi	25
3.7 Simetri dan Point Group	26
3.7.1 Point Group	27
3.8 Teorema Fonon	27
3.9 Interpolasi Levenberg-Marquardt	34
3.10 Intan	36

IV	METODOLOGI PENELITIAN	38
4.1	Data Perhitungan (DFT)	38
4.2	Sarana Penelitian	38
4.3	Tahapan Penelitian	39
4.3.1	Optimasi Konstanta Kisi Intan	40
4.3.2	Optimasi Super Sel Sistem Murni dan <i>vacancy</i> pada material Intan	42
4.3.3	Perhitungan Energi Formasi pada material Intan	42
4.3.4	Perhitungan <i>Phonon-DOS</i> pada material Intan	44
4.3.5	Perhitungan konsentrasi <i>vacancy</i> pada material Intan	45
V	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	50
5.1	Optimasi Konstanta Kisi	50
5.2	Struktur Geometri dan Energi Formasi	51
5.3	Analisa Vibrasi	57
5.4	Konsentrasi <i>Vacancy</i>	60
VI	PENUTUP	63
6.1	Kesimpulan	63
6.2	Saran	63
	DAFTAR PUSTAKA	64

DAFTAR TABEL

3.1	Operasi dan elemen Simetri serta simbolnya	26
3.2	Tabel karakteristik <i>Point Group</i> T_d	27
3.3	Tabel karakteristik <i>Point Group</i> D_{2d}	27
4.1	Data Perhitungan DFT pada Diamond	38
4.2	Data Sarana Perhitungan DFT)	39
5.1	Hasil relaksasi super sel: L_1 dan L_2 masing-masing merupakan ja- rak atom tetangga kedua sekitar <i>vacancy</i> , ΔV merupakan rasio peru- bahan volume <i>defect</i> terhadap volume ideal, $\Delta V = \frac{V_f - V_0}{V_0}$, E_{total}/N adalah energi total per satuan atom dan E_f adalah energi formasi dari masing-masing sistem <i>vacancy</i>	55
5.2	Hasil kalkulasi energi formasi pada intan menggunakan berbagai me- tode.	56

DAFTAR GAMBAR

3.1	Diagram alir perulangan dari <i>self-consistent iterative</i> pada persamaan Kohn-Sham	20
3.2	Ilustrasi potensial semu pada perhitungan DFT	23
3.3	Ilustrasi <i>defect</i> titik pada sebuah sistem kristal : (a). <i>defect vacancy</i> , (b). <i>defect substitusi</i> dan (c). <i>defect interstisial</i>	24
3.4	Struktur Nitrogen (N_2)	29
3.5	Kanan : Kurva energi potensial terhadap jarak kisi, Kanan. Kiri : Kurva energi potensial terhadap jarak kisi pada daerah optimum (<i>ground state</i>)	30
3.6	Ilustrasi vibrasi atomik pada sistem 3 dimensi. R_i^0 adalah posisi awal atom ke- i , R_i adalah posisi akhir atom ke- i dan $u_i(t)$ adalah jarak posisi awal terhadap posisi akhir atom ke- i	31
3.7	Abstraksi persamaan swanilai (eigen) dari persamaan (3.49)	33
3.8	Struktur kristal intan	36
4.1	Diagram alir penelitian.	40
4.2	Unit sel material Intan (C8)	43
4.3	Super sel murni (C64 dan C216) pada material Intan	43
5.1	Optimasi konstanta kisi pada kristal intan. Optimasi dilakukan dengan melakukan fitting data pada energi total (eV) terhadap volume unit sel (\AA^3)	51
5.2	Sistem super sel <i>vacancy</i> C63 (atas) dan C215 (bawah). Atom warna merah merupakan 4 atom tetangga pertama dari <i>vacancy</i>	52
5.3	Diagram fase selama proses relaksasi untuk sistem <i>vacancy</i> C63 (atas) dan C215 (bawah). Dengan keterangan IS: <i>initial state</i> , TS: <i>transition state</i> , dan FS: <i>final state</i>	54
5.4	Struktur geometri tetrahedral (T_d) [kiri] dan dihedral (D_{2d}) [kanan] pada sistem <i>vacancy</i>	55
5.5	Hubungan antara perpindahan atom terhadap jarak atom (\AA) dari lokasi <i>vacancy</i>	57
5.6	Kurva hubungan antara frekuensi vibrasi (cm^{-1}) terhadap ragam getar pada intan. Warna hitam mengindikasikan sistem <i>pristine</i> dan warna biru mengindikasikan sistem <i>vacancy</i>	58

5.7	Kurva <i>phonon density of states</i> (P-DOS) untuk sistem <i>pristine</i> (hitam) dan <i>vacancy</i> (biru) pada intan	59
5.8	Kurva entropi formasi tervibrasi (k_b) terhadap peningkatan suhu	60
5.9	Konsentrasi <i>vacancy</i> sebagai fungsi invers suhu untuk sistem <i>vacancy</i> pada intan	62