

DAFTAR ISI

Halaman Judul	ii
Halaman Pengesahan	iii
Halaman Pernyataan	vi
Halaman Persembahan	vii
Halaman Motto	viii
PRAKATA	ix
INTISARI	xiii
ABSTRACT	xiv
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah	1
1.2 Tinjauan Pustaka	2
1.3 Perumusan Masalah	4
1.4 Batasan Masalah	4
1.5 Tujuan Penelitian	5
1.6 Manfaat Penelitian	5
1.7 Sistematika Penulisan Skripsi	5
II LANDASAN TEORI	7
2.1 Dasar dari <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	7
2.1.1 Pendekatan Born-Oppenheimer	8
2.1.2 Prinsip Variasi	9
2.1.3 Pendekatan Hartree-Fock	10
2.2 Density Functional Theory	12
2.2.1 Exchange-Correlation Functional	18
2.3 <i>Birch Murnaghan Equation of State</i> BM- EOS	23
2.4 Energi Pembentukan (<i>Energy Formation</i>)	25
2.5 Simetri dan <i>Point Group</i>	26

2.5.1	<i>Point Group</i>	26
2.5.2	Efek Jahn-Teller	29
2.6	Intan	29
2.6.1	Struktur Ruang Kristal pada Intan	30
2.6.2	<i>Brillouin zones</i> (Zona Brillouin)	32
2.7	<i>Defect</i> (cacat) Kristal	33
2.8	Nitrogen	34
III METODE PENELITIAN		35
3.1	Waktu dan Tempat Penelitian	35
3.2	Tahapan Penelitian	35
3.3	Sarana Penelitian	37
IV HASIL DAN PEMBAHASAN		40
4.1	Penentuan k-point dan Energi <i>Cutoff</i>	40
4.2	Optimasi Konstanta Kisi	41
4.3	Perlakuan Perijinan Relaksasi Atom - atom	42
4.4	Energi Formasi	43
4.4.1	Perhitungan potensial kimia karbon (C) dan potensial kimia nitrogen(N)	43
4.4.2	Energi formasi sistem <i>defective crystal</i> dalam intan	44
4.5	Distorsi	46
4.5.1	Simetri	49
V KESIMPULAN DAN SARAN		51
5.1	Kesimpulan	51
5.2	Saran	51