

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN JUDUL</b>	<b>ii</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b>	<b>iv</b>
<b>HALAMAN PERNYATAAN</b>	<b>iv</b>
<b>HALAMAN PERSEMBAHAN</b>	<b>v</b>
<b>HALAMAN MOTTO</b>	<b>vi</b>
<b>PRAKATA</b>	<b>vii</b>
<b>DAFTAR ISI</b>	<b>xi</b>
<b>INTISARI</b>	<b>xvi</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xvii</b>
<b>I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
1.1 Latar Belakang . . . . .	1
1.2 Perumusan Masalah . . . . .	4
1.3 Tujuan Penelitian . . . . .	4
1.4 Manfaat Penelitian . . . . .	4
1.5 Kebaruan dan Posisi Penelitian . . . . .	5
1.6 Tinjauan Pustaka . . . . .	5
1.7 Metodologi . . . . .	10
1.8 Sistematika Penulisan . . . . .	12
<b>II LANDASAN TEORETIK</b>	<b>13</b>
2.1 Teori Thomas-Fermi dan Perluasannya . . . . .	13
2.1.1 Teori Thomas-Fermi (TF) . . . . .	13
2.1.2 Hubungan Teori TF dengan Persamaan Schrödinger . . . . .	15
2.1.3 Teori Thomas-Fermi-Dirac (TFD) . . . . .	17
2.1.4 Teori Thomas-Fermi-von Weizsäcker (TFW) . . . . .	17
2.1.5 Teori Thomas-Fermi-Dirac-von Weizsäcker (TFDW) . . . . .	18

2.1.6	Perluasan Model TFDW dengan Penambahan Potensial Akibat Elektron Pribumi: Penerapan pada Sistem Kristal . . . . .	19
2.1.7	Perluasan Teori TF: Fungsional Energi Bebas-Orbital . . . . .	20
2.2	Metode Langsung Kalkulus Variasi . . . . .	23
2.2.1	Ruang $L^p$ dan Ruang Sobolev . . . . .	23
2.2.2	Kalkulus Variasi . . . . .	29
2.2.3	Analisis Cembung ( <i>Convex</i> ) . . . . .	31
2.2.4	Teorema Keberadaan . . . . .	34
<b>III ESTIMASI MINIMIZER PADA SISTEM FISIS:</b>		
	<b>LAHIRNYA FUNGSI 'PAYUNG'</b>	<b>38</b>
3.1	Estimasi <i>Minimizer</i> Model TFDW dalam Pengaruh Potensial Luar . . . . .	38
3.2	Estimasi <i>Minimizer</i> pada Fungsional Energi Bebas-Orbital . . . . .	44
<b>IV PENERAPAN FUNGSI PAYUNG PADA SISTEM KRISTAL</b>		<b>49</b>
4.1	Kristal NaCl . . . . .	49
4.2	Model Elektron Pribumi Terkonsentrasi . . . . .	52
4.3	Model Elektron Pribumi Terdistribusi . . . . .	58
4.3.1	Hubungan Kerapatan Elektron dengan Faktor Struktur . . . . .	58
4.3.2	Faktor Struktur pada NaCl . . . . .	59
<b>V PENERAPAN LAIN FUNGSI PAYUNG:</b>		
	<b>KUANTUM DOT DUA DIMENSI</b>	<b>72</b>
5.1	TFK dalam Kuantum Dot . . . . .	72
5.2	Terapan Fungsi Payung . . . . .	75
<b>VI KESIMPULAN DAN SARAN</b>		<b>82</b>
6.1	Kesimpulan . . . . .	82
6.2	Saran . . . . .	82
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>		<b>83</b>
<b>LAMPIRAN</b>		
<b>A INTERNATIONAL TABLES FOR CRYSTALLOGRAPHY</b>		<b>88</b>

## DAFTAR TABEL

4.1	Faktor hamburan $\text{Na}^+$ dan $\text{Cl}^-$ (Prince, 2004) . . . . .	62
4.2	Perhitungan faktor hamburan dan faktor struktur kristal NaCl . . . . .	64
4.3	Komponen kerapatan elektron pribumi . . . . .	65
1.1	Mean atomic scattering factors in electrons for chemical significant ions (Prince, 2004) . . . . .	88

## DAFTAR GAMBAR

1.1	Alur penelitian . . . . .	11
4.1	Struktur kristal NaCl . . . . .	50
4.2	Potensial kristal NaCl . . . . .	51
4.3	Gambaran fungsi payung $b^2(\mathbf{x})$ di wilayah seperdelapan bagian kubus $fcc$ NaCl pada beberapa nilai $z$ (Wahyuni dkk., 2016a) . . . . .	52
4.4	Gambaran kontur fungsi payung di wilayah seperdelapan bagian kubus $fcc$ NaCl pada beberapa nilai $z$ (Wahyuni dkk., 2016a) . . . . .	53
4.5	Gambaran potensial dan fungsi payung $b^2(\mathbf{x})$ di wilayah seperdelapan bagian kubus $fcc$ NaCl pada beberapa nilai $z$ untuk model elektron pribumi terkonsentrasi (tampak depan/samping) . . . . .	54
4.6	Gambaran lain potensial dan fungsi payung $b^2(\mathbf{x})$ di wilayah seperdelapan bagian kubus $fcc$ NaCl pada beberapa nilai $z$ untuk model elektron pribumi terkonsentrasi (tampak atas) . . . . .	55
4.7	Gambaran potensial dan fungsi payung $b^2(\mathbf{x})$ di wilayah satu kubus $fcc$ NaCl pada beberapa nilai $z$ untuk model elektron pribumi terkonsentrasi (tampak depan/samping) . . . . .	56
4.8	Gambaran lain potensial dan fungsi payung $b^2(\mathbf{x})$ di wilayah satu kubus $fcc$ NaCl pada beberapa nilai $z$ untuk model elektron pribumi terkonsentrasi (tampak atas) . . . . .	57
4.9	Basis data JCPDS untuk nomor file 5-0628 (Waseda dkk., 2011) . . . . .	61
4.10	Gambaran kerapatan elektron pribumi di wilayah seperdelapan bagian kubus $fcc$ NaCl pada beberapa nilai $z$ . . . . .	65
4.11	Gambaran kerapatan elektron pribumi di wilayah satu kubus $fcc$ NaCl pada beberapa nilai $z$ . . . . .	66
4.12	Gambaran fungsi payung $b^2(\mathbf{x})$ di wilayah seperdelapan bagian kubus $fcc$ NaCl pada beberapa nilai $z$ (tampak depan/samping) . . . . .	67
4.13	Gambaran fungsi payung $b^2(\mathbf{x})$ pada wilayah seperdelapan bagian kubus $fcc$ NaCl pada beberapa nilai $z$ (tampak atas) . . . . .	68
4.14	Gambaran fungsi payung $b^2(\mathbf{x})$ pada wilayah satu kubus $fcc$ NaCl pada beberapa nilai $z$ (tampak depan/samping) . . . . .	69
4.15	Gambaran fungsi payung $b^2(\mathbf{x})$ di wilayah satu kubus $fcc$ NaCl pada beberapa nilai $z$ (tampak atas) . . . . .	70

4.16	Kontur potensial total dan fungsi payung $b^2(\mathbf{x})$ yang terkait pada beberapa nilai $z$ . . . . .	71
5.1	Profil fungsi payung sebagai fungsi jarak $r$ , di dalam kuantum dot dua dimensi dengan variasi jumlah elektron $N$ . . . . .	76
5.2	Profil fungsi payung dalam kuantum dot dengan variasi kuat osilasi potensial harmonik $\omega$ , untuk jumlah elektron $N = 6$ . . . . .	77
5.3	Profil fungsi payung dalam kuantum dot dengan variasi kuat osilasi potensial harmonik $\omega$ , untuk jumlah elektron $N = 56$ . . . . .	77
5.4	Perbandingan fungsi payung (kurva warna biru) dengan profil kerapatan kuantum dot dari LDA (kurva putus-putus warna merah), Fast Approximation (kurva warna hijau), dan hasil penelitian Alfarisa dkk. (kurva warna oranye) untuk $N = 6$ dan $\omega = 0,5$ . . . . .	78
5.5	Perbandingan fungsi payung (kurva warna biru) dengan profil kerapatan kuantum dot dari LDA (kurva putus-putus warna merah), Fast Approximation (kurva warna hijau), dan hasil penelitian Alfarisa dkk. (kurva warna oranye) untuk $N = 56$ dan $\omega = 0,5$ . . . . .	79
5.6	Profil kerapatan kuantum dot yang dihasilkan dari perhitungan Fast Approximation (kurva warna oranye) dibandingkan dengan perhitungan fungsi payung (kurva warna merah dan biru) untuk $N = 6$ dan $\omega = 0,5$ . . . . .	80
5.7	Profil kerapatan kuantum dot yang dihasilkan dari perhitungan Fast Approximation (kurva warna oranye) dibandingkan dengan perhitungan fungsi payung (kurva warna merah dan biru) untuk $N = 56$ dan $\omega = 0,5$ . . . . .	81