

## DAFTAR ISI

<b>Halaman Judul</b>	<b>ii</b>
<b>Halaman Pengesahan</b>	<b>iii</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>INTISARI</b>	<b>xv</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xvi</b>
<b>I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
1.1 Latar Belakang Masalah . . . . .	1
1.2 Tinjauan Pustaka . . . . .	3
1.3 Perumusan Masalah . . . . .	6
1.4 Tujuan Penelitian . . . . .	6
1.5 Manfaat Penelitian . . . . .	6
1.6 Sistematika Penulisan Skripsi . . . . .	7
<b>II LANDASAN TEORI</b>	<b>8</b>
2.1 Fungsi Gelombang dan Persamaan Schrödinger . . . . .	8
2.2 Pendekatan Born-Oppenheimer . . . . .	11
2.3 Struktur Kristal . . . . .	11
2.3.1 Gelombang Datar dan Zona Brillouin . . . . .	12
2.3.2 Integral dalam Ruang Kisi Balik . . . . .	14
2.3.3 Energi Ambang . . . . .	14
2.4 <i>Density Functional Theory</i> . . . . .	15
2.4.1 Teorema Hohenberg-Kohn . . . . .	15
2.4.2 Persamaan Kohn-Sham . . . . .	18
2.4.3 Fungsional Pertukaran-Korelasi . . . . .	20

2.4.4	Potensial Semu . . . . .	22
2.5	Teori Pita . . . . .	26
2.5.1	Level Fermi dan Fungsi Fermi . . . . .	28
2.6	Struktur Geometri Molekul . . . . .	29
2.6.1	Model VSEPR . . . . .	30
2.6.2	Orbital Hibrid . . . . .	30
2.6.3	Ikatan Ganda . . . . .	32
2.7	Teori Orbital Molekul . . . . .	32
2.7.1	<i>Linear Combination of Atomic Orbital</i> . . . . .	33
2.7.2	<i>Bonding Orbital</i> . . . . .	34
2.7.3	<i>Antibonding orbitals</i> . . . . .	35
2.7.4	Orbital $\sigma$ . . . . .	36
2.7.5	Orbital $\pi$ . . . . .	37
2.8	Operasi Simetri . . . . .	37
2.8.1	Operasi dan Elemen Simetri . . . . .	38
2.9	Perhitungan Nilai Optimum Kisi . . . . .	38
2.9.1	Birch-Murnaghan Equation of State . . . . .	39
2.9.2	Polinomial Orde 2 dan Orde 3 . . . . .	42
<b>III METODE PENELITIAN</b>		<b>43</b>
3.1	Waktu dan Tempat Penelitian . . . . .	43
3.2	Sarana Penelitian . . . . .	43
3.3	Tahapan Penelitian . . . . .	43
<b>IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>		<b>46</b>
4.1	Variasi k-point . . . . .	47
4.2	Variasi Energi Ambang . . . . .	48
4.3	Variasi Fungsi Pertukaran-Korelasi . . . . .	50
4.4	Variasi Kisi Tekuk . . . . .	52
4.5	Struktur Pita Energi dan <i>Partial Charge Density</i> dengan Parameter Kisi Optimal . . . . .	55
4.6	Pemberian <i>Strain</i> . . . . .	62
4.6.1	Struktur Geometri . . . . .	63
4.6.2	Sifat Kelistrikan . . . . .	65

<b>V</b>	<b>KESIMPULAN DAN SARAN</b>	<b>69</b>
5.1	Kesimpulan . . . . .	69
5.2	Saran . . . . .	69