

## 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>xiii</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xiv</b>
<b>I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
1.1 Latar Belakang Masalah . . . . .	1
1.2 Perumusan Masalah . . . . .	3
1.3 Batasan Masalah . . . . .	3
1.4 Tujuan Penelitian . . . . .	3
1.5 Manfaat Penelitian . . . . .	4
1.6 Sistematika Penulisan Skripsi . . . . .	4
<b>II TINJAUAN PUSTAKA</b>	<b>5</b>
<b>III LANDASAN TEORI</b>	<b>9</b>
3.1 Dasar-dasar dari Density Functional Theory . . . . .	9
3.1.1 Pendekatan Born-Oppenheimer . . . . .	10
3.1.2 Asas Variasi . . . . .	11
3.1.3 Pendekatan Hartree-Fock . . . . .	13
3.2 Density Functional Theory . . . . .	15
3.2.1 Teorema Hohenberg-Kohn . . . . .	15
3.2.2 The Kohn-Sham Equation . . . . .	17
3.3 Exchange and Correlation Functional . . . . .	20

3.3.1	<i>Local Density Approximation (LDA)</i> . . . . .	20
3.3.2	<i>Generalized Gradient Approximation (GGA)</i> . . . . .	22
3.4	Metode Gelombang Bidang . . . . .	23
3.5	Pseudopotensial . . . . .	24
3.6	Energi Formasi . . . . .	26
3.7	Birch-Murnaghan equation of states (BM-EOS) . . . . .	27
3.8	Graphene . . . . .	28
3.9	Silikon Karbida . . . . .	29
3.10	Stronsium . . . . .	30
<b>IV</b>	<b>METODE PENELITIAN</b>	<b>31</b>
4.1	Waktu dan Tempat Penelitian . . . . .	31
4.2	Prosedur Penelitian . . . . .	31
4.3	Sarana <i>software</i> Pendukung . . . . .	34
4.3.1	WinSCP . . . . .	34
4.3.2	Tera Term . . . . .	34
<b>V</b>	<b>HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	<b>36</b>
5.1	Tinjauan terhadap sistem <i>unit cell</i> SiC . . . . .	36
5.1.1	Perhitungan <i>K-Point</i> dan Energi <i>Cut-off</i> . . . . .	36
5.1.2	Optimasi Konstanta Kisi . . . . .	38
5.1.3	Pembuktian keplanaran struktur SiC . . . . .	39
5.2	Tinjauan terhadap sistem 2D-SiC . . . . .	40
5.2.1	<i>Interstitial</i> Sr pada <i>hollow-site</i> . . . . .	40
5.2.2	Substitusi Sr pada atom C . . . . .	42
5.2.3	Substitusi Sr pada atom Si . . . . .	43
5.3	Perhitungan Energi Formasi . . . . .	44
5.4	Perhitungan <i>Band Structure</i> . . . . .	45
<b>VI</b>	<b>KESIMPULAN DAN SARAN</b>	<b>50</b>
6.1	Kesimpulan . . . . .	50
6.2	Saran . . . . .	50

## DAFTAR TABEL

5.1	Tabel hasil perhitungan energi <i>cut-off</i> . . . . .	36
5.2	Tabel hasil perhitungan <i>k-point</i> . . . . .	37
5.3	Tabel hasil perhitungan energi formasi 2D-SiC dengan perbesar- an $4 \times 4 \times 1$ . . . . .	44
5.4	Tabel hasil perhitungan <i>band structure</i> untuk sistem <i>perfect</i> SiC .	46
5.5	Tabel hasil perhitungan <i>band structure</i> untuk sistem <i>defect</i> . . . .	46

## DAFTAR GAMBAR

4.1	Gambar unit sel SiC . . . . .	32
4.2	<i>Supercell</i> 2D-SiC. (a) Sistem <i>perfect</i> 2D-SiC; (b) <i>Defect hollow-site</i> 2D-SiC; (c) Substitusi Sr pada atom C; (d) Substitusi Sr pada atom Si	33
4.3	Bagan alur penyelesaian persamaan Kohn-Sham . . . . .	35
5.1	Grafik hubungan antara energi total (Hartree) dan energi <i>cut-off</i> (Rydberg)	36
5.2	Grafik hubungan antara <i>Energi (Hartree)</i> dan <i>k-point</i> . . . . .	37
5.3	Hasil <i>fitting</i> energi total (Hartree) dan <i>volume</i> (bohr) . . . . .	38
5.4	Hasil dari kalkulasi 2D-SiC dengan <i>interstitial</i> pada <i>hollow-site</i> , dengan (a) merupakan hasil kalkulasi jika dilihat dari samping, dan (b) hasil kalkulasi jika dilihat dari atas . . . . .	41
5.5	Pergerakan atom Sr pada 2D-SiC <i>hollow-site</i> . . . . .	41
5.6	Hasil dari kalkulasi 2D-SiC dengan substitusi <i>defect</i> pada salah satu atom C, dengan (a) merupakan hasil kalkulasi jika dilihat dari samping, dan (b) hasil kalkulasi jika dilihat dari atas . . . . .	42
5.7	Pergerakan atom Sr pada substitusi Sr di atom C . . . . .	42
5.8	Hasil dari kalkulasi 2D-SiC dengan substitusi <i>defect</i> pada salah satu atom Si, dengan (a) merupakan hasil kalkulasi jika dilihat dari samping, dan (b) hasil kalkulasi jika dilihat dari atas . . . . .	43
5.9	Pergerakan atom Sr pada substitusi Sr di atom Si . . . . .	43
5.10	<i>Band structure</i> (a) unit sel SiC; (b) <i>density of state</i> unit sel SiC. . . . .	46
5.11	Perbandingan <i>Band structure</i> untuk variasi sistem 2D-SiC. . . . .	48