



## 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>DAFTAR LAMBANG DAN SINGKATAN</b>	<b>xv</b>
<b>INTISARI</b>	<b>xvi</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xvii</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 Density Functional Theory . . . . .	9
3.1.1 Pendekatan Born - Oppenheimer . . . . .	10
3.1.2 Asas Variasi . . . . .	10
3.1.3 Pendekatan Hartree - Fock . . . . .	12
3.2 Density Functional Theory . . . . .	14
3.2.1 Teori Hohenberg - Kohn . . . . .	14
3.2.2 The Kohn - Sham Equation . . . . .	16



3.3	Exchange dan Corelation Functional . . . . .	19
3.3.1	Local Density Approximation (LDA) . . . . .	19
3.3.2	Generalized Gradient Approximation (GGA) . . . . .	20
3.4	Metode Plane Wave . . . . .	22
3.5	Pseudopotensial . . . . .	23
3.6	Birch-Murnaghan equation of states (BM-EOS) . . . . .	23
3.7	Germanium dua dimensi ( <i>germanene</i> ) sebagai analogi dari <i>graphene</i> . . . . .	25
3.7.1	Graphene . . . . .	25
3.7.2	Germanium . . . . .	28
3.7.3	Germanene . . . . .	30
3.8	Energi Formasi Sistem <i>Defect</i> . . . . .	30
<b>IV METODE PENELITIAN</b>		<b>31</b>
4.1	Metode Komputasi . . . . .	31
4.2	Tahapan Komputasi . . . . .	31
4.2.1	Optimasi <i>lattice</i> konstan . . . . .	31
4.2.2	Konstruksi Unit sel dan Super sel . . . . .	33
4.2.3	Impuritas Cu pada <i>germanene</i> . . . . .	34
4.3	Struktur geometri impuritas Cu pada <i>germanene</i> . . . . .	35
4.3.1	Perhitungan Energi Formasi . . . . .	35
4.3.2	Perhitungan pita energi . . . . .	36
<b>V HASIL DAN PEMBAHASAN</b>		<b>38</b>
5.1	Tinjauan terhadap parameter komputasi . . . . .	38
5.1.1	Tinjauan terhadap variasi <i>k-points</i> . . . . .	38
5.1.2	Tinjauan terhadap variasi nilai energi <i>cut-off</i> . . . . .	39
5.2	Tinjauan terhadap Sistem Germanene Murni . . . . .	40
5.2.1	Tinjauan terhadap struktur <i>germanene planar</i> dan <i>buckling</i> . . . . .	40
5.2.2	Tinjauan terhadap kestabilan <i>germanene planar</i> dan <i>buckling</i> . . . . .	41
5.2.3	Tinjauan terhadap pita energi dan distribusi charge <i>germanene planar</i> dan <i>buckling</i> . . . . .	43
5.3	Tinjauan terhadap struktur geometri super sel <i>germanene 2x2x1</i> . . . . .	45
5.3.1	Tinjauan terhadap geometri <i>Germanene 2x2x1</i> . . . . .	45
5.3.2	Tinjauan terhadap impuritas Cu pada super sel <i>2x2x1</i> . . . . .	46
5.4	Tinjauan terhadap struktur geometri <i>germanene 4x4x1</i> . . . . .	46
5.4.1	Tinjauan terhadap struktur <i>germanene</i> murni <i>4x4x1</i> . . . . .	46



5.4.2	Tinjauan terhadap geometri impuritas Cu pada super sel <i>ger-</i> <i>manene</i> 4x4x1 . . . . .	48
5.5	Tinjauan terhadap Karakteristik elektronik <i>germanene</i> dengan impu- ritas atom Cu . . . . .	51
<b>VI</b>	<b>PENUTUP</b>	<b>56</b>
6.1	Simpulan . . . . .	56
6.2	Saran . . . . .	56
	<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	<b>57</b>