

DAFTAR ISI

HALAMAN PERSETUJUAN	ii
PERNYATAAN.....	iii
MOTTO DAN PERSEMBAHAN.....	iv
PRAKATA.....	v
DAFTAR ISI.....	vii
DAFTAR GAMBAR.....	ix
DAFTAR TABEL	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Batasan Masalah.....	3
1.4 Tujuan Penelitian	3
1.5 Manfaat Penelitian	3
1.6 Sistematika Penulisan	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	5
BAB III LANDASAN TEORI.....	8
3.1 <i>Density Functional Theory</i>	8
3.1.1 Pendekatan Born-Oppenheimer	9
3.1.2 Asas Variasi	10
3.1.3 <i>Exchange Correlation Functional</i>	12
3.1.4 Metode Gelombang Bidang	14
3.1.5 Pseudopotensial.....	15
3.2 Birch-Murnaghan <i>Equation of State</i> (BM-EOS).....	18
3.3 <i>Germanene</i>	20
3.4 Adsorpsi Gas	22
3.5 Oksigen	22
3.6 Aplikasi <i>Germanene</i>	22
BAB IV METODE PENELITIAN	24
4.1 Waktu dan Tempat Penelitian	24

4.2 Metode Komputasi	24
4.3 Tahapan Komputasi	25
4.3.1 Konstruksi Unitsel dan Supersel	25
4.3.2 Impuritas O ₂ pada <i>Germanene</i>	27
4.4 Struktur Geometri O ₂ pada <i>Germanene</i>	27
4.4.1 Menghitung Energi Formasi	27
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN	29
5.1 Tinjauan terhadap Parameter Komputasi	29
5.2 Tinjauan terhadap Struktur Supersel <i>Germanene</i> 4 x 4 x 1	30
5.3 Tinjauan terhadap Adsorpsi O ₂ pada <i>Germanene</i>	32
5.3.1 Tinjauan terhadap O ₂ pada Supersel <i>Germanene</i> 4 x 4 x 1	32
5.3.2 Tinjauan terhadap Difusi Oksigen pada <i>Germanene</i>	43
5.3.3 Tinjauan terhadap NO ₂ pada Supersel <i>Germanene</i> 4 x 4 x 1	46
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN.....	54
6.1 Kesimpulan	54
6.2 Saran.....	54
DAFTAR PUSTAKA.....	55

DAFTAR GAMBAR

Gambar 3.1 <i>Germanene</i> tampak depan.....	21
Gambar 3.2 <i>Germanene</i> tampak samping.....	21
Gambar 4.1 Unit sel dan Supersel <i>germanene</i>	25
Gambar 4.2 Posisi O ₂ H-site pada <i>germanene</i>	26
Gambar 4.3 Posisi O ₂ W-site pada <i>germanene</i>	26
Gambar 4.4 Flowchart penelitian.....	28
Gambar 5.1 Supersel <i>germanene</i> 4 x 4 x 1	31
Gambar 5.2 Konfigurasi H-site O ₂ pada <i>germanene</i> sebelum kalkulasi.....	34
Gambar 5.3 Sudut Ge-O-Ge yang terbentuk pada konfigurasi H-site	35
Gambar 5.4 Konfigurasi W-site O ₂ pada <i>germanene</i> sebelum kalkulasi.....	36
Gambar 5.5 Sudut Ge-O-O yang terbentuk pada konfigurasi W-site	37
Gambar 5.6 Konfigurasi H-site O ₂ pada <i>germanene</i> sesudah kalkulasi	38
Gambar 5.7 Konfigurasi W-site O ₂ pada <i>germanene</i> sesudah kalkulasi	39
Gambar 5.8 Proses difusi O ₂ pada <i>germanene</i>	44
Gambar 5.9 Konfigurasi H-site NO ₂ pada <i>germanene</i> sebelum kalkulasi.....	47
Gambar 5.10 Konfigurasi B-site NO ₂ pada <i>germanene</i> sebelum kalkulasi	47
Gambar 5.11 Konfigurasi H-site NO ₂ pada <i>germanene</i> sesudah kalkulasi	48
Gambar 5.12 Konfigurasi B-site NO ₂ pada <i>germanene</i> sesudah kalkulasi.....	48
Gambar 5.13 Struktur B-site sesudah kalkulasi	49

DAFTAR TABEL

Tabel 5.1 Parameter konfigurasi H-site dengan <i>defect</i> O ₂ sebelum kalkulasi	34
Tabel 5.2 Parameter konfigurasi W-site dengan <i>defect</i> O ₂ sebelum kalkulasi	36
Tabel 5.3 Parameter konfigurasi H-site dengan <i>defect</i> O ₂ sesudah kalkulasi	38
Tabel 5.4 Parameter konfigurasi W-site dengan <i>defect</i> O ₂ sesudah kalkulasi	29
Tabel 5.5 Parameter konfigurasi H-site dan W-site dengan <i>defect</i> O ₂	41
Tabel 5.6 E _{form} pada konfigurasi H-site dan W-site dengan <i>defect</i> O ₂	42
Tabel 5.7 Parameter struktur A pada B-site sesudah kalkulasi	49
Tabel 5.8 Parameter struktur B pada B-site sesudah kalkulasi	50
Tabel 5.9 Parameter struktur C pada B-site sesudah kalkulasi	50
Tabel 5.10 Parameter geometri konfigurasi H-site dan W-site	50
Tabel 5.11 E _{form} pada konfigurasi H-site dan B-site dengan <i>defect</i> NO ₂	53