

## DAFTAR ISI

<b>Halaman Pernyataan</b>	<b>i</b>
<b>Lembaran Pengesahan</b>	<b>ii</b>
<b>Pedoman Penggunaan Skripsi</b>	<b>iv</b>
<b>Prakata</b>	<b>vi</b>
<b>Lembaran Terima Kasih</b>	<b>vii</b>
<b>Abstrak (versi Bahasa Indonesia)</b>	<b>ix</b>
<b>Abstract (English version)</b>	<b>x</b>
<b>I Pendahuluan</b>	<b>1</b>
I.1 Latar Belakang . . . . .	1
I.2 Rumusan Masalah . . . . .	2
I.3 Tujuan . . . . .	2
I.4 Batasan Masalah . . . . .	2
I.5 Manfaat . . . . .	2
<b>II Studi Literatur</b>	<b>3</b>
II.1 Persamaan Schrödinger . . . . .	3
II.1.1 Persamaan Schrödinger untuk banyak partikel . . . . .	3
II.1.2 <i>Density Functional Theory</i> (DFT) . . . . .	4
II.2 Fisika Zat Padat . . . . .	5
II.2.1 Struktur Kristal . . . . .	5
II.2.2 <i>Reciprocal Lattice</i> . . . . .	9
II.2.3 Ikatan dalam kristal . . . . .	10

<i>DAFTAR ISI</i>	xii
II.2.4 Teorema Bloch . . . . .	11
II.2.5 Energi Formasi . . . . .	12
II.3 Software Quantum Espresso . . . . .	13
II.3.1 Algoritma DFT dalam Quantum Espresso . . . . .	13
II.3.2 Input Quantum Espresso . . . . .	14
II.3.3 Output pada Quantum Espresso . . . . .	14
<b>III Metode Penelitian</b>	<b>16</b>
III.1 Model Komputasi . . . . .	16
III.2 Jenis Komputasi . . . . .	17
III.2.1 Optimisasi <i>Bulk</i> dan <i>Alloy</i> . . . . .	17
III.3 Alur Kalkulasi . . . . .	17
III.4 Kegiatan Penelitian . . . . .	19
<b>IV Hasil dan Pembahasan</b>	<b>21</b>
IV.1 Optimisasi <i>Bulk</i> Cu . . . . .	21
IV.1.1 Parameter <i>k point</i> . . . . .	21
IV.1.2 Parameter <i>Cutoff Energy</i> . . . . .	22
IV.1.3 Parameter <i>Lattice Constant</i> . . . . .	24
IV.2 Optimisasi <i>Bulk</i> Pd . . . . .	35
IV.2.1 Parameter <i>k point</i> . . . . .	35
IV.2.2 Parameter <i>Cutoff Energy</i> . . . . .	35
IV.2.3 Parameter <i>Lattice Constant</i> . . . . .	38
IV.3 Optimisasi CuPd <i>Alloy</i> . . . . .	46
IV.3.1 Parameter <i>k point</i> . . . . .	46
IV.3.2 Parameter <i>Cutoff Energy</i> . . . . .	46
IV.3.3 Parameter <i>Lattice Constant</i> . . . . .	50
IV.4 Energi Formasi CuPd . . . . .	56
<b>V Kesimpulan dan Saran</b>	<b>58</b>
V.1 Kesimpulan . . . . .	58

<i>DAFTAR ISI</i>	xiii
V.2 Saran . . . . .	58
<b>Bibliografi</b>	<b>59</b>
<b>A Input File Quantum Espresso</b>	<b>60</b>
<b>B Output File Quantum Espresso</b>	<b>64</b>

## DAFTAR GAMBAR

II.1 Struktur kristal kubik yang berpusat pada permukaan, (a) representasi sebuah sel satuan <i>hard-sphere</i> , (b) sebuah sel satuan <i>reduced-sphere</i> , dan (c) kumpulan dari banyak atom yang menyusun membentuk kristal. . . . .	7
II.2 Model Bloch yang memiliki potensial periodik. . . . .	12
II.3 Input pada program QE. . . . .	15
II.4 Output pada program QE. . . . .	15
III.1 Model <i>bulk</i> sc Cu, bcc Cu, dan fcc Cu. . . . .	16
III.2 Model <i>bulk</i> sc Pd, bcc Pd, dan fcc Pd. . . . .	16
III.3 Model sc CuPd, bcc CuPd, dan fcc CuPd. . . . .	17
III.4 Alur Kalkulasi . . . . .	18
III.5 <i>Flowchart</i> untuk optimisasi <i>bulk</i> dan <i>alloy</i> . . . . .	19
IV.1 Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>k point</i> yang sesuai untuk sc Cu adalah $n = 9$ . . . . .	24
IV.2 Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>k point</i> yang sesuai untuk bcc Cu adalah $n = 9$ . . . . .	27
IV.3 Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>k point</i> yang sesuai untuk fcc Cu adalah $n = 8$ . . . . .	28
IV.4 Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>cutoff energy</i> yang sesuai untuk sc Cu adalah 33,809 Ry atau 460 eV. . . . .	32
IV.5 Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>cutoff energy</i> yang sesuai untuk bcc Cu adalah 34,544 Ry atau 470 eV. . . . .	32
IV.6 Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>cutoff energy</i> yang sesuai untuk fcc Cu adalah 34,544 Ry atau 470 eV. . . . .	33

<i>DAFTAR GAMBAR</i>	xv
IV.7 Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>lattice constant</i> untuk sc Cu adalah 2,408 Å. . . . .	33
IV.8 Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>lattice constant</i> yang sesuai untuk bcc Cu adalah 2,889 Å. . . . .	34
IV.9 Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>lattice constant</i> yang sesuai untuk fcc Cu adalah 3,630 Å. . . . .	34
IV.10Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>k point</i> yang sesuai untuk sc Pd adalah $n = 8$ . . . . .	37
IV.11Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>k point</i> yang sesuai untuk bcc Pd adalah $n = 8$ . . . . .	38
IV.12Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>k point</i> yang sesuai untuk bcc Pd adalah $n = 9$ . . . . .	42
IV.13Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>cutoff energy</i> yang sesuai untuk sc Pd adalah 30,869 Ry atau 420 eV. . . . .	43
IV.14Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>cutoff energy</i> yang sesuai untuk bcc Pd adalah 30,869 Ry atau 420 eV. . . . .	43
IV.15Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>cutoff energy</i> yang sesuai untuk fcc Pd adalah 30,869 Ry dan 420 eV. . . . .	44
IV.16Grafik hasil kalkulasi menunjukkan nilai <i>lattice constant</i> yang sesuai untuk sc Pd adalah 2,614 Å. . . . .	44
IV.17Grafik hasil kalkulasi menunjukkan nilai <i>lattice constant</i> yang sesuai untuk bcc Pd adalah 3,138 Å. . . . .	45
IV.18Grafik hasil kalkulasi menunjukkan nilai <i>lattice constant</i> yang sesuai untuk fcc Pd adalah 3,953 Å. . . . .	45
IV.19Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>k point</i> yang sesuai untuk sc CuPd adalah $n = 8$ . . . . .	50
IV.20Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>k point</i> yang sesuai untuk bcc CuPd adalah $n = 9$ . . . . .	51
IV.21Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>k point</i> yang sesuai untuk fcc CuPd adalah $n = 9$ . . . . .	52

<i>DAFTAR GAMBAR</i>	xvi
IV.22 Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>cutoff energy</i> yang sesuai untuk sc CuPd adalah 33,074 Ry atau 450 eV. . . . .	52
IV.23 Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>cutoff energy</i> yang sesuai untuk bcc CuPd adalah 32,339 Ry atau 440 eV. . . . .	53
IV.24 Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>cutoff energy</i> yang sesuai untuk fcc CuPd adalah 33,809 Ry atau 460 eV. . . . .	53
IV.25 Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>lattice constant</i> yang sesuai untuk sc CuPd adalah 3,016 Å. . . . .	54
IV.26 Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>lattice constant</i> yang sesuai untuk bcc CuPd adalah 4,466 Å. . . . .	55
IV.27 Grafik hasil kalkulasi menunjukkan <i>lattice constant</i> yang sesuai untuk fcc CuPd adalah 5,001 Å. . . . .	55

## DAFTAR TABEL

II.1 Bentuk kristal setiap elemen pada tabel periodik . . . . .	8
III.1 Jadwal pelaksanaan penelitian . . . . .	20
IV.1 Tabel hasil kalkulasi <i>k point</i> sc Cu. . . . .	22
IV.2 Tabel hasil kalkulasi <i>k point</i> bcc Cu. . . . .	23
IV.3 Tabel hasil kalkulasi <i>k point</i> fcc Cu. . . . .	23
IV.4 Tabel hasil kalkulasi sc Cu terhadap parameter <i>cutoff energy</i> pada sc Cu. . . . .	25
IV.5 Tabel hasil kalkulasi bcc Cu terhadap parameter <i>cutoff energy</i> .	26
IV.6 Tabel hasil kalkulasi fcc Cu terhadap parameter <i>cutoff energy</i> .	26
IV.7 Tabel hasil kalkulasi sc Cu terhadap parameter <i>lattice constant</i> .	29
IV.8 Tabel hasil kalkulasi bcc Cu terhadap parameter <i>lattice constant</i> .	30
IV.9 Tabel hasil kalkulasi fcc Cu terhadap parameter <i>lattice constant</i> .	31
IV.10Tabel hasil kalkulasi Cu untuk semua <i>lattice</i> terhadap semua parameter . . . . .	32
IV.11Tabel hasil kalkulasi <i>k point</i> sc Pd. . . . .	36
IV.12Tabel hasil kalkulasi <i>k point</i> sc Pd. . . . .	36
IV.13Tabel hasil kalkulasi <i>k point</i> fcc Pd. . . . .	39
IV.14Tabel hasil kalkulasi sc Cu terhadap parameter <i>cutoff energy</i> pada sc Pd. . . . .	39
IV.15Tabel hasil kalkulasi sc Cu terhadap parameter <i>cutoff energy</i> pada bcc Pd. . . . .	40
IV.16Tabel hasil kalkulasi sc Cu terhadap parameter <i>cutoff energy</i> pada fcc Pd. . . . .	41
IV.17Tabel hasil kalkulasi Pd untuk semua <i>lattice</i> terhadap semua parameter . . . . .	42

## DAFTAR TABEL

xviii

IV.18	Tabel hasil kalkulasi <i>k point</i> sc CuPd. . . . .	47
IV.19	Tabel hasil kalkulasi <i>k point</i> bcc CuPd. . . . .	48
IV.20	Tabel hasil kalkulasi <i>k point</i> fcc CuPd. . . . .	48
IV.21	Parameter <i>cutoff energy</i> pada sc CuPd. . . . .	49
IV.22	Parameter <i>cutoff energy</i> pada bcc CuPd. . . . .	49
IV.23	Parameter <i>cutoff energy</i> pada fcc CuPd. . . . .	54
IV.24	Tabel hasil kalkulasi CuPd <i>alloy</i> untuk semua <i>lattice</i> terhadap semua parameter . . . . .	55
IV.25	Energi <i>cohesive</i> setelah optimisasi struktur kristal. . . . .	56
IV.26	Energi formasi CuPd. . . . .	57