

DAFTAR ISI

Halaman Judul	i
Persetujuan Ujian Tugas Akhir	ii
Pernyataan Orisinalitas	iii
Halaman Pengesahan Skripsi	iv
Pernyataan Persetujuan Publikasi Skripsi Untuk Kepentingan Akademis	v
Kata Pengantar	vi
Daftar Isi	vii
Daftar Tabel	ix
Daftar Gambar	x
Daftar Lampiran	xi
Arti Lambang Dan Singkatan	xii
Abstrak	xiv
Abstract	xv
Bab I Pendahuluan	1
1.1 Latar Belakang dan Permasalahan	1
1.2 Tujuan Penelitian	4
1.3 Manfaat Penelitian	4
Bab II Dasar Teori	5
2.1 Persamaan Schrödinger	5
2.2 Metode Hartree dan Metode Hartree–Fock	8
2.3 Density Functional Theory (DFT)	10
2.3.1 Hohenberg–Kohn	11
2.3.2 Kohn–Sham	11
2.4 Algoritma Perhitungan Density Functional Theory	13
2.5 Termoelektrik	14
2.6 Material Termoelektrik SnSe	15
Bab III Metodologi Penelitian	17
3.1 Tempat dan Waktu Penelitian	17
3.2 Program Simulasi	17
3.2.1 Quantum ESPRESSO	17
3.2.2 VESTA	17
3.3 Model Simulasi	18
3.3.1 SnSe Unit Cell (SnSe–UC)	18
3.3.2 SnSe Supercell (SnSe–SC)	19
3.3.3 SnSe Terdoping Ni (SnSe–Ni)	19
3.4 Fungsional Exchange–Correlation dan Parameter Simulasi	20
3.5 Langkah Perhitungan	20
3.5.1 Optimasi Geometri	21
3.5.2 Perhitungan Band Structure	21
3.5.3 Perhitungan DOS dan PDOS	22
3.5.4 Perhitungan Sifat Termoelektrik	22
3.6 Diagram Alir Quantum ESPRESSO	23
3.7 Diagram Alir Penelitian	24

Bab IV Hasil dan Pembahasan	25
4.1 Studi Konvergensi.....	25
4.2 Optimasi Geometri.....	27
4.2.1 Optimasi Geometri Unit Cell.....	27
4.2.2 Optimasi Geometri Supercell	29
4.2.3 Optimasi Geometri Terdoping Ni	30
4.3 Sifat Elektronik	31
4.3.1 Band Structure	31
4.3.2 Projected Density of States (PDOS)	34
4.4 Sifat Termoelektrik.....	37
4.4.1 Koefisien Seebeck	37
4.4.2 Konduktivitas Listrik	41
4.4.3 Faktor Daya	45
Bab V Kesimpulan	49
5.1 Kesimpulan	49
5.2 Saran	49
Daftar Pustaka	50
Lampiran....	50