

DAFTAR ISI

SURAT PERNYATAAN KARYA SENDIRI.....	i
LEMBAR PERSETUJUAN.....	ii
LEMBAR PENGESAHAN	iii
LEMBAR PERSEMBAHAN	iv
ABSTRAK	v
ABSTRACT.....	vi
KATA PENGANTAR	vii
DAFTAR ISI.....	ix
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR TABEL.....	xii
BAB I.....	1
PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan Penelitian.....	3
1.4 Batasan Masalah.....	3
1.5 Metode Pengumpulan Data	3
1.6 Sistematika Penulisan.....	4
BAB II.....	5
LANDASAN TEORI.....	5
2.1 Material Perovskit	5
2.2 Fonon	6
2.1.1 Rantai Monoatomik.....	7
2.1.2 Rantai Diatomik	9
2.3 Konstanta Dielektrik.....	11
2.4 DFT (<i>Density Functional Theory</i>).....	12
2.5 Quantum ESPRESSO.....	15
2.5.1 Pseudopotensial.....	15
2.5.2 Gelombang Bidang (<i>Plane Waves</i>)	15

BAB III	17
METODOLOGI PENELITIAN.....	17
3.1 Tempat Penelitian.....	17
3.2 Alat, Model Molekul, dan Optimasi Penelitian.....	17
3.2.1 Alat Penelitian.....	17
3.2.2 Struktur Molekul	18
3.2.3 Optimasi Penelitian	18
3.3 Prosedur Penelitian.....	20
3.4 Diagram Alir.....	22
BAB IV	23
HASIL DAN PEMBAHASAN.....	23
4.1 Variasi Parameter Perhitungan.....	24
4.1.1 Variasi Energi <i>Cutoff</i>	24
4.1.2 Variasi <i>K-Points</i>	26
4.2 Dispersi Fonon	29
4.3 <i>Phonon Density of States (PHDOS)</i>	32
BAB V.....	36
PENUTUP.....	36
5.1 Kesimpulan.....	36
5.2 Saran	36
DAFTAR PUSTAKA	37

