

DAFTAR ISI

HALAMAN PERSETUJUAN	i
HALAMAN PENGESAHAN	iv
HALAMAN PERNYATAAN	iv
HALAMAN PERSEMBAHAN	v
HALAMAN MOTTO	vi
PRAKATA	vii
DAFTAR ISI	ix
DAFTAR TABEL	xi
DAFTAR GAMBAR	xii
INTISARI	xiii
ABSTRACT	xiv
I PENDAHULUAN	1
1.1. Latar Belakang Masalah	1
1.2. Perumusan Masalah	5
1.3. Batasan Masalah	6
1.4. Tujuan Penelitian	6
1.5. Manfaat Penelitian	6
II TINJAUAN PUSTAKA	8
III LANDASAN TEORI	13
3.1. Dasar <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	13
3.2. Pendekatan Born-Oppenheimer	14
3.3. Pendekatan Hartree-Fock	15
3.4. <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	17
3.4.1. Teorema Hohenberg-Kohn	17
3.4.2. Persamaan Kohn-Sham	20
3.5. Exchange - Correlation Functional	22
3.6. Bagan Alur Penyelesaian Kalkulasi dengan Metode DFT	24
3.7. Kestabilan Sistem	24
3.7.1. Energi inklusi	24
3.7.2. Energi formasi	26
3.7.3. Energi adsorpsi	26
3.8. <i>Charge Transfer</i>	27
3.9. <i>Charge Density Difference</i>	27

3.10. Molekul Obat	28
3.10.1. <i>Hydroxyurea</i>	28
3.10.2. <i>Paracetamol</i>	28
3.11. Program Implementasi Metode DFT	30
IV METODE PENELITIAN	31
4.1. Fasilitas Penelitian	31
4.2. Alur Penelitian	32
4.3. Metode Komputasi Berbasis DFT	34
4.4. Tahapan Kalkulasi	34
4.4.1. Perhitungan Energi Kestabilan Sistem	35
V HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	37
5.1. Struktur C_{60} dengan Molekul Kecil	37
5.2. Struktur Molekul Obat	42
5.3. Struktur C_{60} dan $Si - C_{60}$ dengan Molekul Obat	44
VI PENUTUP	52
6.1. Kesimpulan	52
6.2. Saran	53
DAFTAR PUSTAKA	54