

## DAFTAR ISI

<b>Halaman Judul</b>	<b>i</b>
<b>Halaman Pengesahan</b>	<b>ii</b>
<b>Halaman Pernyataan</b>	<b>iii</b>
<b>Halaman Persembahan</b>	<b>iv</b>
<b>Halaman Motto</b>	<b>v</b>
<b>PRAKATA</b>	<b>vi</b>
<b>DAFTAR ISI</b>	<b>vii</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	<b>xi</b>
<b>DAFTAR TABEL</b>	<b>xii</b>
<b>INTISARI</b>	<b>xiii</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xiv</b>
<b>I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
1.1 Latar Belakang Masalah . . . . .	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 . . . . .	3
<b>II TINJAUAN PUSTAKA</b>	<b>5</b>
<b>III LANDASAN TEORI</b>	<b>9</b>
3.1 Konsep <i>Density Functional Theory</i> . . . . .	9
3.1.1 Persamaan Kohn-Sham . . . . .	9
3.1.2 Siklus <i>Self Consistent Field</i> DFT . . . . .	11

3.2	Rimantadin . . . . .	12
3.3	<i>Fullerene</i> dan <i>Heterofullerene</i> . . . . .	13
3.4	Persentase Error . . . . .	14
3.5	Energi Adsorpsi . . . . .	14
3.6	Sifat-Sifat Elektronik Molekul . . . . .	15
3.6.1	Energi HOMO dan LUMO . . . . .	16
3.6.2	Celah Pita Energi . . . . .	16
3.6.3	Potensial Kimia Elektronik . . . . .	16
3.6.4	Kekerasan Kimia . . . . .	17
3.6.5	Indeks Elektrofilitas . . . . .	17
3.6.6	Transfer Muatan . . . . .	17
<b>IV</b>	<b>METODE PENELITIAN</b>	<b>18</b>
4.1	Fasilitas dan Waktu Penelitian . . . . .	18
4.2	Perangkat Penelitian . . . . .	18
4.2.1	Perangkat Keras . . . . .	18
4.2.2	Perangkat Lunak . . . . .	18
4.3	Parameter Akurasi Komputasi . . . . .	20
4.4	Diagram Alir Penelitian . . . . .	20
4.5	Tata Laksana Penelitian . . . . .	21
4.5.1	Studi Literatur . . . . .	21
4.5.2	Instalasi Perangkat Lunak . . . . .	21
4.5.3	Optimasi Geometri Molekul Obat Rimantadin maupun <i>Fullerene</i> <i>C<sub>60</sub></i> . . . . .	22
4.5.4	Seleksi <i>Heterofullerene</i> <i>C<sub>59</sub>M</i> (M = B, Al, Ga, Si, Ge) . . . . .	23
4.5.5	Peningkatan Energi Adsorpsi Melalui Penambahan Atom N . . . . .	24
4.5.6	Optimasi Posisi Interaksi 2 Molekul Obat Rimantadin dengan <i>Heterofullerene</i> <i>C<sub>52</sub>(AlN<sub>3</sub>)<sub>2</sub></i> . . . . .	26
4.5.7	Optimasi Jumlah Atom N untuk Membawa 3 Molekul Obat Rimantadin . . . . .	27
<b>V</b>	<b>HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	<b>28</b>
5.1	Optimasi Geometri Molekul Obat Rimantadin maupun <i>Fullerene</i> <i>C<sub>60</sub></i> . . . . .	28
5.2	Seleksi <i>Heterofullerene</i> <i>C<sub>59</sub>M</i> (M = B, Al, Ga, Si, Ge) . . . . .	32
5.3	Peningkatan Energi Adsorpsi Melalui Penambahan Atom N . . . . .	39

5.4	Optimasi Posisi Interaksi 2 Molekul Obat Rimantadin dengan <i>Heterofullerene</i> $C_{52}(AlN_3)_2$ . . . . .	42
5.5	Optimasi Jumlah Atom N untuk Membawa 3 Molekul Obat Rimantadin . . . . .	44
<b>VI KESIMPULAN DAN SARAN</b>		<b>49</b>
6.1	Kesimpulan . . . . .	49
6.2	Saran . . . . .	49
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>		<b>50</b>
<b>LAMPIRAN</b>		<b>56</b>
<b>A Tabel Analisis Data</b>		<b>56</b>
1.1	Energi Adsorpsi . . . . .	56
<b>B Source Code</b>		<b>57</b>
2.1	Optimasi Geometri Molekul Obat Rimantadin . . . . .	57
2.2	Optimasi Geometri <i>Fullerene</i> $C_{60}$ . . . . .	60
2.3	Sistem Interaksi Molekul Obat Rimantadin dengan <i>Fullerene</i> $C_{60}$ . . . .	63