

DAFTAR ISI

HALAMAN PERSETUJUAN	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI.....	vii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR GAMBAR.....	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang Masalah.....	1
1.2 Perumusan Masalah.....	5
1.3 Batasan Masalah.....	5
1.4 Tujuan Penelitian.....	5
1.5 Manfaat Penelitian.....	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	7
BAB III LANDASAN TEORI.....	12
3.1 Dasar <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	12
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 <i>Exchange – Correlation Functional</i>	23
3.6 Bagan Alur Penyelesaian Kalkulasi dengan Metode DFT	25
3.7 Kestabilan Sistem.....	25
3.7.1 Energi adsorpsi.....	25
3.7.2 Celah Pita Energi	27
3.7.3 Energi HOMO LUMO	28
3.7.4 Potensial kimia elektronik.....	30
3.7.5 Kekerasan kimia.....	30

3.7.6	Indeks elektrofilitas	30
3.7.7	Transfer muatan maksimum.....	31
3.7.8	Transfer muatan berdasarkan indeks elektrofilitas.....	31
3.8	C ₆₀	32
3.9	Molekul obat.....	33
3.9.1	<i>Dopamine</i>	33
3.10	Program Implementasi Metode DFT.....	34
BAB IV METODE PENELITIAN		35
4.1	Perangkat Penelitian	35
4.2	Alur penelitian	36
4.3	Metode Komputasi Berbasis DFT	37
4.4	Tahap Kalkulasi.....	37
4.4.1	Perhitungan Energi Kestabilan.....	40
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN		41
5.1	Optimasi Geometri Struktur Molekul Obat <i>Dopamine</i>	41
5.2	Optimasi Geometri <i>Fullerene C₆₀</i>	42
5.3	Interaksi molekul obat <i>dopamine</i> dan <i>Fullerene C₆₀</i>	44
5.4	Interaksi molekul obat <i>dopamine</i> dengan <i>C₅₉Si</i> , <i>C₅₉Sn</i> , dan <i>C₅₈BN</i>	46
5.5	<i>Density Of State</i> (DOS)	47
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN		57
6.1	Kesimpulan.....	57
6.2	Saran.....	57
DAFTAR PUSTAKA.....		58

DAFTAR TABEL

Tabel 3. 1 Rentang nilai jenis energi adsorpsi (Inglezakis dan Zorpas, 2012).	
.....	26
Tabel 3. 2 Rentang nilai jenis energi ikat (Bhushan, 1999).	26
Tabel 4. 1 Spesifikasi Komputer.	35
Tabel 5. 1 Nilai distorsi untuk $C_{59}Si$, $C_{59}Sn$, dan $C_{58}BN$.	43
Tabel 5. 2 Analisa data HOMO, LUMO, energi adsorpsi (E_{ads}), celah pita energi (E_{gap}), potensial kimia elektronik (μ), kekerasan kimia (η), indeks elektrofilisitas (ω), dan transfer muatan (ΔN_{max}).	53
Tabel 5. 3 Analisa data <i>Electrophilicity-based Charge Transfer</i> (ECT)	56

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1. 1 Struktur Fullerene bola speris yang terstruktur dari 60 atom karbon.	1
Gambar 3. 1 Struktur pita energi pada semikonduktor (Ariswan, 2010)	27
Gambar 3. 2 Struktur elektronik semikonduktor organik (a) tipe-n dan (b) tipe-p (Sholihun, 2009).....	29
Gambar 3. 3 Struktur dopamine.	33
Gambar 4. 1 Diagram alur penelitian.	36
Gambar 4. 2 Alur perhitungan menggunakan program PHASE0 dengan metode DFT.	38
Gambar 4. 3 Langkah kalkulasi (a) molekul obat dan Fullerene C ₆₀ murni dan (b) molekul Fullerene C ₆₀ dengan doping menggunakan PHASE0 dengan metode DFT.	40
Gambar 5. 1 Struktur molekul obat dopamine menggunakan <i>Phase viewer</i>	41
Gambar 5. 2 Plot <i>Molecular Electrostatic Potential</i> (MEP) pada obat dopamine (a) Atom N menghadap ke atas dan (b) Atom N menghadap ke depan	41
Gambar 5. 3 Struktur <i>Fullerene C₆₀</i> murni menggunakan <i>Phase viewer</i>	43
Gambar 5. 4 Struktur (a)C ₅₉ Si; (b)C ₅₉ Sn; dan (c)C ₅₈ BN menggunakan <i>Phase viewer</i>	44
Gambar 5. 5 Struktur hasil kalkulasi <i>Fullerene C₆₀</i> murni dengan obat dopamine	45
Gambar 5. 6 Struktur hasil kalkulasi <i>Fullerene</i> (a)C ₅₉ Si, (b)C ₅₉ Sn, dan (c)C ₅₈ BN dengan obat dopamine	46
Gambar 5. 7 DOS untuk dopamine.....	48
Gambar 5. 8 DOS untuk (a)Fullerene C ₆₀ murni dan (b)dopamine C ₆₀ murni	49
Gambar 5. 9 DOS untuk (a) C ₅₉ Si dan (b) dopamine C ₅₉ Si	50
Gambar 5. 10 DOS untuk (a) C ₅₉ Sn dan (b) dopamine C ₅₉ Sn	51
Gambar 5. 11 DOS untuk (a) C ₅₈ BN dan (b) dopamine C ₅₈ BN.....	52