

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN PENGESAHAN</b> .....	ii
<b>PERNYATAAN</b> .....	iv
<b>PRAKATA</b> .....	v
<b>DAFTAR ISI</b> .....	vii
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	x
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	xi
<b>INTISARI</b> .....	xiii
<b>ABSTRACT</b> .....	xiv
<b>I PENDAHULUAN</b> .....	1
<b>1.1 Latar Belakang</b> .....	1
<b>1.2 Perumusan Masalah</b> .....	5
<b>1.3 Batasan Masalah</b> .....	5
<b>1.4 Tujuan Penelitian</b> .....	6
<b>1.5 Manfaat Penelitian</b> .....	6
<b>II TINJAUAN PUSTAKA</b> .....	7
<b>III LANDASAN TEORI</b> .....	10
<b>3.1 Dasar DFT</b> .....	10
<b>3.2 Pendekatan Born-Oppenheimer</b> .....	13
<b>3.3 Pendekatan Hartree-Fock</b> .....	14
<b>3.4 Density Functional Theory (DFT)</b> .....	16
<b>3.4.1 Teorema Hohenberg-Kohn</b> .....	16

3.4.2 Persamaan Kohn-Sham .....	19
3.5 <i>Exchange – Correlation Functional</i> .....	21
3.5.1 <i>Local Density Approximation (LDA)</i> .....	21
3.5.2 <i>Generalized Gradient Approximation (GGA)</i> .....	22
3.5.3 <i>Pseudopotensial (PP)</i> .....	22
3.6 Bagan Alur Penyelesaian Kalkulasi dengan Metode DFT .....	23
3.7 Kestabilan Sistem .....	24
3.7.1 Energi Formasi .....	24
3.7.2 Energi Adsorpsi .....	24
3.7.3 Energi Celah Pita (Gap) .....	25
3.7.4 Energi HOMO LUMO .....	25
3.8 Nilai <i>Charge Transfer</i> .....	26
3.8.1 Potensial Kimia Elektronik ( $\mu$ ) .....	26
3.8.2 <i>Chemical Hardness</i> ( $\eta$ ) .....	27
3.8.3 Indeks elektrofilitas ( $\omega$ ) .....	27
3.8.4 Transfer Muatan Maksimum ( $\Delta N_{max}$ ) .....	27
3.8.5 Nilai ECT .....	28
3.9 Fullerena C <sub>60</sub> .....	28
3.10 Nukleobasa DNA/RNA .....	29
3.10.1 Adenin (C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub> ) .....	30
3.10.2 Sitosin (C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O) .....	31
3.10.3 Guanin (C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub> O) .....	31
3.10.4 Timin (C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub> ) .....	32

3.10.5 Urasil ( $C_4H_4N_2O_2$ )	33
3.11 Program Implementasi Metode DFT	33
IV METODE PENELITIAN	35
4.1 Fasilitas Penelitian	35
4.2 Alur Penelitian	36
4.3 Metode Komputasi Berbasis DFT	38
4.4 Tahap Kalkukulasi	38
4.4.1 Langkah-langkah Konstruksi Model	40
4.4.2 Perhitungan Energi Kestabilan Sistem	42
V HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	44
5.1 Struktur Fullerena $C_{60}$	44
5.2 Struktur Molekul Nukleobasa	46
5.3 Struktur Fullerena $C_{59}Si$ dengan Molekul Nukleobasa	49
VI KESIMPULAN	58
6.1 Kesimpulan	58
6.2 Saran	58
VII DAFTAR PUSTAKA	59