

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iv
KATA PENGANTAR	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	4
II.1 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 Hidrogen dan Bahan Bakar Hidrogen	4
II.1.2 Teknologi Penyimpanan Hidrogen	5
II.1.3 <i>Metal-organic Frameworks</i> (MOF)	7
II.1.4 MOF-650	9
II.1.5 Modifikasi MOF-650	10
II.1.6 Logam Mg dan Senyawa Azulena dalam Penyimpanan Hidrogen	11
II.1.7 <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	13
II.1.8 Simulasi <i>Grand Canonical</i> Monte Carlo (GCMC)	14
II.2 Rumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	15
II.2.1 Dasar Pemikiran Hipotesis I	15
II.2.2 Dasar Pemikiran Hipotesis II	15
II.2.3 Dasar Pemikiran Hipotesis III	16
II.2.3 Rancangan Penelitian	16
BAB III METODE PENELITIAN	18
III.1 Peralatan Penelitian	18

III.2 Prosedur Penelitian	18
III.2.1 Penentuan Momen Dipol	18
III.2.2 Perhitungan DFT	18
III.2.3 Simulasi <i>Grand Canonical Monte Carlo</i> (GCMC)	21
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	22
IV.1 Analisis Momen Dipol	22
IV.2 Struktur MOF-650 Murni dan Termodifikasi	26
IV.3 Analisis Muatan Parsial	30
IV.4 Analisis <i>Density of States</i> (DOS)	31
IV.5 Kapasitas Penyimpanan Hidrogen	35
IV.6 Energi Interaksi Hidrogen terhadap MOF	39
IV.7 Analisis <i>Electrostatic Potential Map</i> (ESP)	45
IV.8 Analisis <i>Radial Distribution Function</i> (RDF)	47
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	50
V.1 Kesimpulan	50
V.2 Saran	51
DAFTAR PUSTAKA	52
LAMPIRAN	59