

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	ix
INTISARI	x
ABSTRACT	xi
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar belakang	1
I.2 Tujuan penelitian	2
I.3 Manfaat penelitian	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	4
II.1 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 Fotokatalisis	4
II.1.2 Zirkonium titanat (ZrTiO ₄)	6
II.1.3 Peningkatan efisiensi kinerja katalis melalui doping	9
II.1.4 Fotoreduksi karbondioksida	10
II.1.5 Metode komputasi DFT	13
II.2 Perumusan hipotesis dan rancangan penelitian	15
II.2.1 Perumusan hipotesis I	15
II.2.2 Perumusan hipotesis II	16
II.2.3 Rancangan penelitian	17
BAB III METODE PENELITIAN	18
III.1 Peralatan Penelitian	18
III.1.1 Perangkat keras	18
III.1.2 Perangkat lunak	18
III.2 Model Material	18
III.3 Lokasi Penelitian	18
III.4 Prosedur Penelitian	19
III.4.1 Pemodelan dan optimasi katalis ZrTiO ₄ (111)	19
III.4.2 Pendopongan dengan atom sulfur (S)	19
III.4.3 Penentuan situs adsorpsi dan reaksi reduksi CO ₂ pada permukaan katalis	20
III.4.4 Perhitungan struktur elektronik	21

BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	22
IV.1 Sifat geometri dan elektronik ZrTiO ₄ pristine	22
IV.2 Sifat geometri dan elektronik ZrTiO ₄ -S	24
IV.3 Sifat fotokatalitik katalis ZrTiO ₄ dan ZrTiO ₄ -S	26
IV.4 Adsorpsi CO ₂ pada permukaan ZrTiO ₄ dan ZrTiO ₄ -S	28
IV.5 Penentuan jalur mekanisme reaksi reduksi CO ₂	31
IV.6 Evaluasi jalur mekanisme reaksi reduksi CO ₂ pada ZrTiO ₄	33
IV.7 Evaluasi jalur mekanisme reaksi reduksi CO ₂ pada ZrTiO ₄ -S	35
IV.8 Efek doping sulfur katalis ZrTiO ₄ pada reaksi reduksi CO ₂	36
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	38
V.1 Kesimpulan	38
V.2 Saran	38
DAFTAR PUSTAKA	39
LAMPIRAN	45