

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
SURAT PERNYATAAN	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	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 Adsorpsi fenol	4
II.1.2 Material TiO_2	5
II.1.3 Dopan non logam	9
II.1.4 DFT	10
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	12
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	12
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	12
II.2.3 Rancangan penelitian	13
BAB III METODE PENELITIAN	14
III.1 Peralatan	14
III.1.1 Perangkat keras	14
III.1.2 Perangkat lunak	14
III.2 Model Kajian	14
III.3 Prosedur Penelitian	16
III.4 Analisis Kuantitatif	17
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	18
IV.1 Konvergensi Nilai Energi <i>Cut Off</i>	18
IV.2 Struktur Geometri dan Energi Total Material TiO_2 (101) Murni dan Terdoping C	19
IV.3 Penentuan Posisi Interaksi Terstabil Fenol pada Material TiO_2 (101) Murni	21
IV.4 Energi Adsorpsi Fenol dengan Material TiO_2 (101) Murni	24
IV.5 Rapat muatan antara fenol dengan material TiO_2 (101) Murni	26
IV.6 Posisi Interaksi Terstabil Fenol pada Material TiO_2 (101) Terdoping Karbon	27
IV.7 Energi Adsorpsi Fenol dengan Material TiO_2 (101) Terdoping Karbon	31

IV.8 Rapat muatan antara fenol dengan material TiO_2 (101) Terdoping Karbon	34
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	36
V.1 Kesimpulan	36
V.2 Saran	36
DAFTAR PUSTAKA	37
LAMPIRAN	41