

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERTANYAAN BEBAS PLAGIASI	ii
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	2
I.3 Manfaat Penelitian	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	4
II.1 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 Fenol	4
II.1.2 Zirkonium Titanat (ZrTiO ₄)	4
II.1.3 DFT+U	6
II.1.4 Studi Komputasi Tahap Adsorpsi Fenol pada Fotokatalis	7
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	8
II.2.1 Perumusan Hipotesis 1	8
II.2.2 Perumusan Hipotesis 2	8
II.2.3 Rancangan Penelitian	9
BAB III METODE PENELITIAN	10
III.1 Peralatan	10
III.1.1 Perangkat Keras	10
III.1.2 Perangkat Lunak	10
III.2 Model Kajian	10

III.3 Prosedur Penelitian	11
III.4 Analisis Kuantitatif	12
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	13
IV.1 Optimasi Geometri ZrTiO ₄ (111)	13
IV.2 Penentuan Posisi Doping Sulfur Terstabil pada Permukaan Fotokatalis ZrTiO ₄ (111)	15
IV.3 Struktur Geometri Fenol	17
IV.4 Adsorpsi Fenol dengan Permukaan Fotokatalis ZrTiO ₄ (111) Murni	19
IV.5 Adsorpsi Fenol dengan Permukaan Fotokatalis ZrTiO ₄ (111) Terdoping Sulfur	22
IV.6 Hasil Energi Adsorpsi Fenol pada Permukaan ZrTiO ₄ (111) Murni dan Terdoping Sulfur	25
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	28
V.1 Kesimpulan	28
V.2 Saran	28
DAFTAR PUSTAKA	29
LAMPIRAN	33