

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN 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	4
I.3 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Kajian komputasi dalam katalisis	5
II.1.2 Teori fungsi kerapatan	6
II.1.3 Kajian teoretis reaksi HDO terkatalisis	7
II.1.4 Katalis platinum	8
II.1.5 Grafena oksida tereduksi	10
II.1.6 Gliserol	12
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	14
II.2.1 Perumusan hipotesis I	14
II.2.2 Perumusan hipotesis II	15
II.2.3 Perumusan hipotesis III	16
II.2.4 Rancangan penelitian	16
BAB III METODE PENELITIAN	17
III.1 Lokasi Penelitian	17
III.2 Peralatan Penelitian	17
III.2.1 Perangkat keras	17
III.2.2 Perangkat lunak	17
III.3 Prosedur Penelitian	17
III.3.1 Optimasi geometri	19
III.3.2 Kalkulasi sifat elektronik	20
III.3.3 Kalkulasi energi dalam reaksi HDO gliserol	20
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	22
IV.1 Optimasi Geometri Material Katalis	22
IV.2 Optimasi Geometri Sistem dengan Penambahan Adsorbat	29
IV.2.1 Optimasi geometri adsorbat	31
IV.2.2 Optimasi geometri gliserol yang teradsorpsi pada Pt-rGO	31

IV.2.3 Optimasi geometri senyawa diol yang teradsorpsi pada Pt-rGO	34
IV.3 Analisis Rapat Muatan	36
IV.3.1 Analisis rapat muatan rGO	36
IV.3.2 Analisis rapat muatan Pt yang terembankan pada grafena dan rGO	37
IV.3.3 Analisis rapat muatan gliserol yang teradsorpsi pada Pt-rGO	39
IV.4 Analisis Sifat Elektronik	42
IV.5 Variabel Energi dalam Reaksi HDO Gliserol	46
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	52
V.1 Kesimpulan	52
V.2 Saran	52
DAFTAR PUSTAKA	53
LAMPIRAN	60