

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iii
KATA PENGANTAR	iv
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	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	6
II.1 Tinjauan Pustaka	6
II.1.1 <i>Metal-organic frameworks</i>	6
II.1.2 MOF-74	9
II.1.3 Interaksi MOF-74 dengan molekul gas	11
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	13
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	13
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	14
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	15
II.2.4 Rancangan penelitian	16
BAB III METODE PENELITIAN	17
III.1 Alat Penelitian	17
III.2 Bahan Penelitian	17
III.3 Prosedur Penelitian	17
III.3.1 Optimasi struktur Zn-MOF-74	17
III.3.2 Optimasi struktur M/Zn-MOF-74	18
III.3.3 Perhitungan <i>single point energy</i>	19
III.3.4 Studi interaksi dengan molekul CO ₂	19
III.3.5 Studi interaksi dengan molekul H ₂ O	20
III.3.6 Studi interaksi dengan molekul NO ₂	21
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	22
IV.1 Struktur dan Kestabilan Relatif Zn-MOF-74 dan M/Zn-MOF-74	22
IV.1.1 Struktur Zn-MOF-74 dan M/Zn-MOF-74	22
IV.1.2 Kestabilan Relatif Zn-MOF-74 dan M/Zn-MOF-74	27
IV.2 Analisis Sifat Elektronik	33

IV.3 Interaksi Zn-MOF-74 dan M/Zn-MOF-74 dengan Molekul Gas	37
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	45
V.1 Kesimpulan	45
V.2 Saran	46
DAFTAR PUSTAKA	47
LAMPIRAN	51