

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iii
PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR TABEL	vii
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR LAMPIRAN	ix
DAFTAR SINGKATAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Grafena	5
II.1.2 Hidrokarbon aromatik polisiklis (<i>Polycyclic Aromatic Hydrocarbons</i> , PAH)	7
II.1.3 Teori fungsional kerapatan (<i>Density Functional Theory</i> , DFT)	9
II.1.4 Hybrid functional	10
II.1.5 Rapat keadaan (<i>Density of States</i> , DOS)	11
II.1.6 Himpunan basis (<i>Basis sets</i>)	13
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	14
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	14
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	15
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	15
II.2.4 Rancangan penelitian	15

BAB III	METODE PENELITIAN	17
III.1	Alat dan Bahan	17
III.1.1	Perangkat keras	17
III.1.2	Perangkat lunak	17
III.1.3	Objek penelitian	17
III.2	Prosedur Penelitian	18
III.2.1	Validasi metode	18
III.2.2	Optimasi geometri	18
III.2.3	Perhitungan DOS	18
BAB IV	HASIL DAN PEMBAHASAN	19
IV.1	Validasi Metode	19
IV.2	Struktur Molekul	20
IV.3	Profil Energi	22
IV.4	Pengaruh Ukuran dan Bentuk Terhadap Struktur Elektronik PAH	24
IV.5	Pengaruh Cacat Struktural Terhadap Struktur Elektronik PAH	29
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN	32
V.1	Kesimpulan	32
V.2	Saran	32
	DAFTAR PUSTAKA	33
	LAMPIRAN	36