

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iii
MOTO DAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR GAMBAR	ix
ARTI LAMBANG DAN SINGKATAN	xi
INTISARI	xii
ABSTRACT	xiii
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 Semikonduktor	6
II.1.3 Porfirin dan kompleks logam-porfirin	7
II.1.3 Metode teori fungsional kerapatan	9
II.1.4 Himpunan basis	10
II.2 Perumusan Hipotesis	11
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	11
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	12
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	12
II.2.4 Rancangan penelitian	13
BAB III METODE PENELITIAN	15
III.1 Alat dan Bahan	15
III.1.1 Perangkat keras	15
III.1.2 Perangkat lunak	15
III.1.3 Objek penelitian	15
III.2 Prosedur Penelitian	17
III.2.1 Penentuan metode kimia komputasi	17
III.2.2 Optimasi geometri	18

III.3 Pengolahan Data	18
III.3.1 Energi kompleksasi	18
III.2.2 Celah pita energi	18
BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	19
IV.1 Penentuan Metode Kimia Komputasi	19
IV.2 Sifat dan Struktur Kompleks Logam Alkali Tanah Porfirin	20
IV.2.1 Parameter struktur	25
IV.2.2 Parameter energi kompleksasi	29
IV.2.3 Parameter celah pita energi	33
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	46
V.1 Kesimpulan	46
V.2 Saran	46
DAFTAR PUSTAKA	47
LAMPIRAN	50