

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iii
PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR TABEL	viii
INTISARI	ix
ABSTRACT	x
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 Kalkon	5
II.1.2 Bis-Kalkon	6
II.1.3 Material Optik Nonlinier (NLO)	6
II.1.4 Metode Kimia Komputasi	8
II.1.5 <i>Density Functional Theory (DFT)</i>	9
II.1.6 Fungsi Hibrid B3LYP	10
II.1.7 Himpunan Basis	11
II.1.8 <i>Time-Dependent Density Functional Theory (TD-DFT)</i>	13
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	14
II.2.1 Perumusan Hipotesis I	14
II.2.2 Perumusan Hipotesis II	14
II.2.3 Perumusan Hipotesis III	15
II.2.4 Rancangan Penelitian	15
BAB III METODE PENELITIAN	17
III.1 Bahan Penelitian	17
III.2 Peralatan Penelitian	18
III.3 Prosedur Penelitian	18
III.3.1 Pemodelan dan Optimasi Geometri Molekul	18
III.3.2 Perhitungan Transisi Elektronik	18



III.3.3 Analisis Reaktivitas Molekul (GCRD)	19
III.3.4 Perhitungan aktivitas NLO	19
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	21
IV.1 Optimasi Geometri	21
IV.2 Analisis Transisi Elektronik	23
IV.3 Analisis Prediksi Spektra UV-Vis	25
IV.4 Analisis Reaktivitas Molekul (GCRD)	28
IV.5 Aktivitas NLO	31
BAB V KESIMPULAN	34
V.1 Kesimpulan	34
V.2 Saran	34
DAFTAR PUSTAKA	35
LAMPIRAN	39