

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	ii
HALAMAN PENGESAHAN	iii
PERNYATAAN	iv
HALAMAN PERSEMBAHAN	v
PRAKATA	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
INTISARI	xii
ABSTRACT	xiii
BAB I PENDAHULUAN	
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Rumusan Masalah	3
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA, DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Kobalt (Co)	5
II.1.2 Struktur kristal kobalt dan kristal hcp	6
II.1.3 Kluster atom logam	7
II.1.4 Interaksi CO dengan permukaan kluster atom logam	8
II.1.5 Teori medan konsisten diri (<i>self consistent field (SCF)</i>)	10
II.1.6 Teori fungsi densitas (<i>density functional theory (DFT)</i>)	11
II.1.7 Teori orbital molekul (<i>molecular orbital theory (MOT)</i>)	15
II.1.8 Selisih energi HOMO-LUMO (<i>HOMO-LUMO energy gap</i>)	16
II.1.9 Interaksi donasi balik (<i>back-bonding interaction</i>)	16
II.1.10 Kemisorpsi CO model Blyholder pada logam	17
II.1.11 Model pengikatan CO pada kluster logam	19
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	20
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	20
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	21
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	21
II.2.4 Perumusan hipotesis 4	22

	II.2.5 Perumusan hipotesis 5	22
	II.2.6 Rancangan penelitian	23
BAB III	METODE PENELITIAN	
	III.1 Alat dan Bahan	27
	III.1.1 Perangkat keras	27
	III.1.2 Perangkat lunak	27
	III.1.3 Bahan Kajian	27
	III.2 Prosedur Penelitian	27
	III.2.1 Pemodelan sel kristal Co hcp dengan 17 atom dan struktur kluster melalui fragmentasi kristal Co hcp	27
	III.2.2 Penentuan fungsi densitas	28
	III.2.3 Penentuan model kluster kobalt	28
	III.2.4 Pengamatan interaksi kluster kobalt dengan satu molekul CO dan CO ₂ serta penentuan posisi interaksi ligan terbaik	29
	III.2.5 Penentuan spektra serapan vibrasi IR kompleks [Co _m CO] dan [Co _m CO ₂]	29
	III.2.6 Pengamatan interaksi coverage pada kluster kobalt	30
	III.3 Pengolahan Data	31
	III.3.1 Selisih energi HOMO-LUMO	31
	III.3.2 Energi kisi	31
	III.3.3 Kuat ikatan ligan-kluster	31
BAB IV	HASIL DAN PEMBAHASAN	
	IV.1 Fungsi Densitas DFT dan Struktur Model Kluster Kobalt	33
	IV.2 Interaksi Kluster Co ₄ dengan Satu Molekul Ligan CO, dan CO ₂	38
	IV.3 Interaksi Coverage Kluster Co ₄ oleh Ligan CO	45
	IV.4 Analisis Frekuensi Serapan Vibrasi	50
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN	
	V.1 Kesimpulan	53
	V.2 Saran	54
	DAFTAR PUSTAKA	55
	LAMPIRAN	59