

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN	iii
MOTTO DAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	vi
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
INTISARI	xii
ABSTRACT	xiii
 BAB I PENDAHULUAN	 1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	4
I.3 Manfaat Penelitian	4
 BAB II TINJAUAN PUSTAKAN DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	 5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Semikonduktor	5
II.1.2 Kompleks Ni-tetrapirrol	7
II.1.3 Spektra serapan elektronik (UV-Vis)	10
II.1.4 Spektra serapan inframerah (IR) dalam senyawa kompleks	13
II.1.5 <i>Density of States</i> (DOS)	13
II.1.6 Teori Kerapatan Fungsional (<i>Density Functional Theory</i> /DFT)	14
II.1.7 Himpunan basis	15
II.1.8 Fungsi densitas B3LYP	17
II.1.9 Metode optimasi	18
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	18
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	18
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	18
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	19
II.2.4 Perumusan hipotesis 4	19
II.2.5 Rancangan penelitian	20
 BAB III METODE PENELITIAN	 22
III.1 Alat dan Bahan	22
III.1.1 Perangkat keras	22
III.1.2 Perangkat lunak	22
III.1.3 Objek penelitian	23
III.2 Prosedur Penelitian	23
III.2.1 Optimasi geometri	23

III.2.2	Perhitungan DOS	24
III.2.3	Perhitungan spektra serapan elektronik (UV-Vis)	24
III.2.4	Perhitungan spektra serapan inframerah (IR)	24
III.3	Pengolahan Data	24
III.3.1	Beda energi HOMO-LUMO	24
BAB IV	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	26
IV.1	Penentuan dan Validasi Metode	26
IV.2	Parameter Struktur Kompleks Ni-tetrapirrol	30
IV.3	Parameter Sifat Semikonduktor Kompleks Ni-tetrapirrol	33
IV.3.1	Harga beda energi HOMO-LUMO kompleks Ni-tetrapirrol	33
IV.3.2	Kelimpahan DOS kompleks Ni-tetrapirrol	35
IV.3.3	Spektra serapan elektronik (UV-Vis)	37
IV.3.4	Spektra serapan inframerah (IR) kompleks Ni-tetrapirrol	39
IV.3.5	Kajian pengaruh substituen terhadap kemampuan Ni-ptalosianin sebagai semikonduktor	43
BAB V	KESIMPULAN	48
V.1	Kesimpulan	48
V.2	Saran	48
	DAFTAR PUSTAKA	49
	LAMPIRAN	53