

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Rumusan Masalah	5
I.3 Tujuan Penelitian	5
I.4 Manfaat Penelitian	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	6
II.1 Tinjauan Pustaka	6
II.1.1 Bahan Semikonduktor	6
II.1.2 Porfirin	8
II.1.3 Kompleks logam-porfirin	10
II.1.4 Kompleks Pd(II)-porfirin	12
II.1.5 Metode <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	13
II.1.6 Fungsi-fungsi <i>hybrid</i>	17
II.1.7 Himpunan basis	19
II.1.8 Spektroskopi	22
II.1.9 <i>Density of State</i>	25
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	26
II.2.1 Perumusan hipotesis	26
II.2.2 Rancangan penelitian	28
BAB III METODE PENELITIAN	30
III.1 Alat dan Bahan	30
III.1.1 Perangkat Keras	30
III.1.2 Perangkat Lunak	30
III.1.3 Objek Penelitian	30
III.2 Prosedur Penelitian	31
III.2.1 Optimasi geometri	31
III.2.2 Perhitungan DOS	31
III.2.3 Perhitungan spektra serapan elektronik	32
III.3 Pengolahan Data	32

	III.3.1 <i>Band Gap</i> (E_g)	32
	III.3.2 Energi kompleksasi	32
BAB IV	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	33
	IV.1 Validasi Metode	33
	IV.2 Struktur dan sifat senyawa kompleks PdP-R	35
	IV.2.1 Parameter struktur	35
	IV.2.2 Parameter energi	41
	IV.2.3 Parameter semikonduktor	45
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN	55
	V.1 Kesimpulan	55
	V.2 Saran	55
	DAFTAR PUSTAKA	57
	LAMPIRAN	63