

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iii
HALAMAN MOTTO DAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Rumusan Masalah	4
I.3 Tujuan Penelitian	4
I.4 Manfaat Penelitian	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	6
II.1 Tinjauan Pustaka	6
II.1.1 Semikonduktor	6
II.1.2 Kompleks logam-porfirin	7
II.1.3 Spektra serapan elektronik	11
II.1.4 <i>Density of states</i>	13
II.1.5 Teori kerapatan fungsional (DFT)	14
II.1.6 B3LYP <i>hybrid functional</i>	15
II.7.7 Himpunan basis	15
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	18
II.2.4 Rancangan penelitian	19

BAB III	METODE PENELITIAN	20
III.1	Alat dan Bahan	20
III.1.1	Perangkat keras	20
III.1.2	Perangkat lunak	20
III.1.3	Objek penelitian	20
III.2	Prosedur Penelitian	21
III.2.1	Optimasi geometri	21
III.2.2	Perhitungan spektra serapan elektronik	21
III.2.3	Perhitungan DOS	22
III.3	Pengolahan Data	22
III.3.1	Energi kompleksasi	22
III.3.2	<i>Band gap</i>	22
BAB IV	HASIL DAN PEMBAHASAN	23
IV.1	Validasi Metode	23
IV.2	Sifat dan Struktur Kompleks HgP-R	24
IV.2.1	Parameter struktur	26
IV.2.2	Parameter energi	28
IV.2.3	Parameter sifat semikonduktor	31
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN	38
V.1	Kesimpulan	38
V.2	Saran	38
	DAFTAR PUSTAKA	39
	LAMPIRAN	42