

DAFTAR ISI

PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR LAMPIRAN	viii
INTISARI	ix
ABSTRACT	x
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	4
I.3 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Zirkonium titanat	5
II.1.2 Fotokatalis	8
II.1.3 Sifat elektronik dan aplikasi ZrTiO ₄ sebagai fotokatalis	9
II.1.4 Unsur nonlogam sebagai dopan	11
II.1.5 Metode komputasi DFT	12
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	15
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	15
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	16
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	16
II.2.4 Perumusan hipotesis 4	17
II.2.5 Rancangan penelitian	17
BAB III METODE PENELITIAN	19
III.1 Peralatan Penelitian	19
III.1.1 Perangkat keras	19
III.1.2 Perangkat lunak	19
III.2 Model Material	19
III.3 Lokasi Penelitian	20
III.4 Prosedur Penelitian	20
III.4.1 Optimasi geometri	21
III.4.2 Perhitungan struktur elektronik	22
III.4.3 Perhitungan aktivitas katalitik	22
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	23
IV.1 Sifat Geometri dan Elektronik ZrTiO ₄ Murni	23
IV.2 Energi Formasi ZrTiO ₄ yang Telah Terdoping	24
IV.3 Geometri dan Sifat Elektronik ZrTiO ₄ Terdoping	26
IV.3.1 Geometri dan sifat elektronik dari X@O	26
IV.3.2 Geometri dan sifat elektronik dari X@Ti	29
IV.3.3 Geometri dan sifat elektronik dari X@Zr	32

	IV.4 Sifat Fotokatalitik ZrTiO ₄ Murni dan Terdoping Atom Nonlogam	35
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN	40
	V.1 Kesimpulan	40
	V.2 Saran	40
	DAFTAR PUSTAKA	41
	LAMPIRAN	45