

DAFTAR ISI

ABSTRAK	i
ABSTRACT	ii
KATA PENGANTAR.....	iii
DAFTAR ISI.....	v
DAFTAR GAMBAR.....	viii
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR ISTILAH	xii
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG	xiii
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	3
1.3 Batasan Masalah	3
1.4 Tujuan Penelitian	3
1.5 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1 Hipertiroidisme	5
2.2 Metimazola.....	6
2.3 Nanocage Al₁₂N₁₂.....	8
2.4 Sistem Penghantar Obat.....	8
2.5 Doping	10
2.6 Kimia Komputasi	10
2.7 Kimia Kuantum.....	11
2.8 Teori Fungsional Kerapatan (DFT)	11
2.9 <i>Time-Dependent Density Functional Theory (TDDFT)</i>	12
2.10 <i>Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM)</i>	12
2.11 <i>Density of States (DOS)</i>	13
2.12 <i>Noncovalent Interaction (NCI) dan Reduce Density Gradient (RGD)</i>	13
2.13 <i>Interaction Region Indikator (IRI)</i>	14
2.14 <i>Independent Gradient Model Hirshfeld (IGMH)</i>	14
2.15 <i>Electrostatic Potential (ESP)</i>	14

BAB III	METODE PENELITIAN	16
3.1	Waktu dan Tempat Penelitian	16
3.2	Bahan, Alat, dan Instrumentasi.....	16
3.2.1	Perangkat Keras (<i>Hardware</i>)	16
3.2.2	Perangkat Lunak (<i>Software</i>)	16
3.2.3	Molekul	17
3.3	Prosedur	17
3.3.1	Rancangan Desain Molekul.....	18
3.3.2	Optimasi Struktur dan Perhitungan Frekuensi.....	18
3.3.3	Perhitungan <i>Quantum Theory of Atom In Molecules</i> (QTAIM)	19
3.3.4	Perhitungan <i>Time-Dependent Density Functional Theory</i> (TDDFT)	
	19
3.4	Rencana Perhitungan	19
BAB IV	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	21
4.1	<i>Nanocage Al₁₂N₁₂</i> dan <i>Nanocage M-Al₁₂N₁₂</i>	21
4.1.1	Optimasi Geometri.....	21
4.1.2	<i>Frontier Molecular Orbital</i> (FMO).....	25
4.1	Sistem Adsorpsi.....	30
4.2.1	Optimasi Geometri.....	30
4.2.2	<i>Frontier Molecular Orbital</i> (FMO).....	32
4.2.3	Analisis <i>Density of States</i> (DOS).....	34
4.1.3	Spektrum <i>Uv-Visible</i>	36
4.2.4	<i>Quantum Theory of Atoms in Molecules</i> (QTAIM)	39
4.2.5	<i>Noncovalent Interactions</i> (NCI) dan <i>Reduce Density Gradient</i> (RDG)	
	40
4.2.6	<i>Interaction Region Indicator</i> (IRI).....	43
4.2.7	<i>Interaction Gradient Model Hirshfeld</i> (IGMH)	44
4.2.8	<i>Electrostatic Potential</i> (ESP)	45
4.2.9	Efek Pelarut	47
4.2.10	<i>Time Recovery</i>	48
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN.....	49
5.1	Kesimpulan	49
5.2	Saran	50
	DAFTAR PUSTAKA	51

SUBJEK INDEKS	56
LAMPIRAN A	57
LAMPIRAN B	64
LAMPIRAN C	74
LAMPIRAN D	79
LAMPIRAN E	80
LAMPIRAN F	81

