

DAFTAR ISI

ABSTRAK	i
ABSTRACT	ii
KATA PENGANTAR	iii
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG	x
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Batasan Masalah	5
1.4 Tujuan Penelitian	5
1.5 Manfaat Penelitian	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	6
2.1 Kimia Komputasi	6
2.2 Pemodelan Molekul	7
2.3 Metode Teori Kerapatan Elektron	8
2.4 Epoksidasi Etilena	9
2.5 Katalis	12
2.6 Aktivasi Peroksida dan Epoksidasi	14
BAB III METODE PENELITIAN	17
3.1 Waktu dan Tempat Penelitian	17
3.2 Bahan, Alat, dan Instrumentasi	17
3.3 Prosedur	18
BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	19
4.1 Mekanisme Reaksi	19
4.2 Struktur Teroptimasi	20
4.2.1 Katalis Vanadium Silika	21
4.2.2 Adsorpsi Hidrogen Peroksida	22
4.2.3 Adsorpsi Etilen	24
4.2.4 Desorpsi Etilena dan Dehidrasi.....	25
4.3 Muatan Atom	27

4.4	Sifat Elektronik.....	28
4.4.1	Momen Dipol.....	28
4.4.2	Celah Energi	29
4.5	Energetika Reaksi.....	31
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN.....	33
5.1	Kesimpulan	33
5.2	Saran.....	33
DAFTAR PUSTAKA		34
SUBJEK INDEKS		39
LAMPIRAN A.....		40
LAMPIRAN B.....		41

