

DAFTAR ISI

ABSTRAK	i
ABSTRACT	ii
KATA PENGANTAR.....	iii
DAFTAR ISI.....	v
DAFTAR GAMBAR.....	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR ISTILAH	x
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG	xi
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 BCNO	5
2.2 Adsorpsi.....	6
2.2.1 Mekanisme Adsorpsi.....	6
2.2.2 Adsorpsi Fisik.....	7
2.2.3 Adsorpsi Kimia	7
2.3 Doping Logam Transisi.....	8
2.4 Zat Warna	9
2.5 Metil Hijau	10
2.6 Kimia Komputasi	10
2.7 Kimia Kuantum.....	11
2.8 <i>Density Functional Theory (DFT)</i>.....	11
2.9 <i>Time-Dependent Density Functional Theory (TDDFT)</i>.....	12
2.10 <i>Natural Bond Orbital (NBO)</i>	13
2.11 <i>Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM)</i>.....	13
BAB III METODE PENELITIAN	14

3.1	Waktu dan Tempat Penelitian	14
3.2	Bahan, Alat, dan Instrumen	14
3.2.1	Perangkat Keras	14
3.2.2	Perangkat Lunak.....	14
3.2.3	Molekul	14
3.3	Prosedur	15
3.3.1	Rancangan Desain Molekul	16
3.3.2	Optimasi Struktur dan Perhitungan Frekuensi	20
3.3.3	Perhitungan <i>Natural Bond Orbital</i> (NBO) dan <i>Quantum Theory of Atom In Molecules</i> (QTAIM)	20
3.3.4	Perhitungan <i>Time-Dependent Density Functional Theory</i> (TDDFT)	
	20	
3.4	Rencana Perhitungan.....	21
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN		22
4.1	<i>Nanosheet Boron Carbon Oxynitride (BCNO/M-BCNO</i>	22
4.1.1	Optimasi Geometri	22
4.1.2	Reaktivitas Global	24
4.1.3	Analisis <i>UV-Visible</i>	27
4.1.4	Analisis <i>Density of States</i> (DOS)	28
4.2	Adsorpsi Fasa Gas	29
4.2.1	Optimasi Geometri dan Energi Adsorpsi	29
4.2.2	Reaktivitas Global	30
4.2.3	Analisis <i>Time-Dependent Density Functional Theory</i> (TDDFT) ...	33
4.2.4	Analisis <i>Density of States</i> (DOS)	35
4.2.5	Analisis <i>Natural Bond Orbital</i> (NBO).....	35
4.2.6	Analisis <i>Quantum Theory of Atom In Molecules</i> (QTAIM)	36
4.2.7	NCI-RDG	38
4.3	Adsorpsi Fasa Cair Pelarut Air	40
4.3.1	Optimasi Geometri dan Energi Adsorpsi	40
4.3.2	Reaktivitas Global	42
4.3.3	Analisis <i>Time-Dependent Density Functional Theory</i> (TDDFT) ...	44
4.3.4	Analisis <i>Density of States</i> (DOS)	45

4.3.5	Analisis <i>Natural Bond Orbital</i> (NBO).....	46
4.3.6	Analisis <i>Quantum Theory of Atom In Molecules</i> (QTAIM)	47
4.3.7	NCI-RDG	49
4.3.8	Energi Solvasi	51
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN	52
5.1	Kesimpulan	52
5.2	Saran	52
DAFTAR PUSTAKA	53
SUBJEK INDEK	60
LAMPIRAN A	61
LAMPIRAN B	65
LAMPIRAN C	71
LAMPIRAN D	83
LAMPIRAN E	90

