

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	4
1.4 Tujuan Penelitian	4
1.5 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1 Pencemaran Udara	5
2.2 Nitrogen Monoksida	6
2.3 Adsorpsi	7
2.3.1 Mekanisme dan Proses Adsorpsi	7
2.3.2 Jenis adsorpsi	8
2.3.3 Faktor yang mempengaruhi adsorpsi	8
2.4 Nanomaterial	9
2.5 Nanocage	10
2.6 Semikonduktor III-V	12
2.6.1 Boron Nitrida (BN)	12
2.6.2 Indium Nitrida (InN)	13
2.6.3 Boron Antimonida (BSb)	14
2.6.4 Indium Antimonida (InSb)	14
2.7 Kimia Komputasi	14
2.8 Density Functional Theory	15
2.8.1 Frontier Molecular Orbital (FMO)	17
2.8.2 Natural Bond Orbital (NBO)	17

2.8.3	<i>Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM)</i>	18
2.8.4	<i>Interaction Region Indicator (IRI)</i>	18
2.8.5	<i>Independent Gradient Model Based on Hirshfeld Partition</i>	19
2.8.6	<i>Electrostatic Potential (ESP)</i>	19
2.9	<i>Time-Dependent Density Functional Theory (TDDFT)</i>	20
BAB III	METODE PENELITIAN	21
3.1	Waktu dan Tempat Penelitian	21
3.2	Bahan, Alat, dan Instrumentasi	21
3.2.1	Perangkat Keras	21
3.2.2	Perangkat Lunak.....	21
3.2.3	Molekul	21
3.3	Prosedur	22
3.3.1	Perancangan Desain Molekul.....	22
3.3.2	Optimasi Struktur	24
3.3.3	Pembuatan file morden.....	24
3.3.4	Perhitungan MD	24
3.3.5	Perhitungan NBO	25
3.3.6	Perhitungan TDDFT	25
3.4	Rencana Perhitungan	25
BAB IV	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	27
4.1	Sifat Struktural	27
4.1.1	<i>Nanocage</i>	27
4.1.2	Nitrogen monoksida	29
4.1.3	Adsorpsi NO pada <i>nanocage</i>	29
4.2	Energi Adsorpsi dan Parameter Termodinamika	32
4.3	Analisis <i>Frontier Molecular Orbital (FMO)</i>	34
4.4	<i>Total Density of States (TDOS), Partial Density of States (PDOS), dan Overlap Population-based Density of States (OPDOS)</i>	38
4.5	Analisis <i>Natural Bond Orbital (NBO)</i>	43
4.6	Analisis <i>Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM)</i>	45
4.7	Simulasi AIMD	46
4.8	Analisis <i>Interaction Region Indicator (IRI)</i>	50
4.9	Analisis <i>Independent Gradient Model Based on Hirshfeld Partition</i> .	52
4.10	Analisis <i>Electrostatic Potential (ESP)</i>	54

4.11 Analisis UV-Vis.....	55
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....	58
5.1 Kesimpulan	58
5.2 Saran.....	58
DAFTAR PUSTAKA	59
SUBJEK INDEKS	69
LAMPIRAN A	70
LAMPIRAN B	75
LAMPIRAN C	82
LAMPIRAN D	87
LAMPIRAN E	88

