

DAFTAR ISI

Halaman Pernyataan	i
Lembaran Pengesahan	ii
Pedoman Penggunaan Skripsi	iv
Surat Pernyataan Orisinalitas	v
Prakata	vi
Lembaran Terima Kasih	vii
Abstrak (versi Bahasa Indonesia)	viii
Abstract (English version)	ix
I Pendahuluan	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Rumusan Masalah	2
I.3 Tujuan	2
I.4 Batasan Masalah	3
I.5 Manfaat	3
II Studi Literatur	4
II.1 Molekul Radikal	4
II.2 Energi Ikat	5
II.3 Struktur Elektronik	6
II.3.1 Persamaan Gerak Mekanika Kuantum	7
II.3.1.1 Persamaan Schrödinger	7
II.3.1.2 Persamaan Schrödinger takbergantung waktu	8

<i>DAFTAR ISI</i>	xi
II.3.2 Model Atomik Secara Mekanika Kuantum	9
II.4 Teori Orbital Molekuler	12
II.4.1 Orbital Atomik dan Molekuler	12
II.4.2 Konsep Ikatan dan Interaksi Orbital	17
II.4.2.1 Energi Interaksi Orbital	17
II.4.2.2 Koefisien orbital molekuler	22
II.5 Diagram Level Energi	25
III Metode Penelitian	27
III.1 Model Komputasi	27
III.2 Alur Penelitian	31
III.3 Alur Kalkulasi	33
III.4 Aktivitas Penelitian	35
III.4.1 Tempat Penelitian	35
III.4.2 Agenda dan Waktu	35
IV Hasil dan Pembahasan	36
IV.1 Struktur Geometris Keadaan Dasar	36
IV.2 Energi Ikat	41
IV.3 Diagram Level Energi	41
IV.4 Kestabilan Molekul Radikal	50
V Kesimpulan dan Saran	52
V.1 Kesimpulan	52
V.2 Saran	53
Bibliografi	54
A Density Functional Theory	56
B File Input	60
C File Output	69

<i>DAFTAR ISI</i>	xii
D Keadaan Spin	71
E Energi Ikat	73

DAFTAR GAMBAR

II.1	Struktur rangka molekul HO ₂	5
II.2	Elemen luas dan volume dalam koordinat Cartesian dan sferis	10
II.3	Ilustrasi orbital s dan p	14
II.4	Orbital atomik s, p, dan d	15
II.5	Orbital atomik oksigen	16
II.6	Ilustrasi overlap dari dua fungsi gelombang orbital s	17
II.7	Ilustrasi dari tipe overlap	17
II.8	Kasus ilustratif dua pusat dua-orbital	18
II.9	DLE untuk kasus degeneratif	20
II.10	DLE untuk kasus nondegeneratif	21
II.12	Diagram interaksi untuk kasus nondegeneratif	25
II.13	Contoh diagram level energi	26
III.1	Model molekul untuk kasus pertama	28
III.2	Model molekul untuk kasus kedua	29
III.3	Model molekul untuk kasus ketiga	30
III.4	Alur penelitian	32
III.5	Alur kalkulasi	34
IV.1	Plot BE kalkulasi vs BE eksperimen	41
IV.2	DLE untuk kasus pertama	44
IV.3	DLE untuk kasus kedua	45
IV.4	DLE untuk kasus ketiga	46
IV.5	Visualisasi HOMO untuk kasus pertama	47
IV.6	Visualisasi HOMO untuk kasus kedua	48
IV.7	Visualisasi HOMO untuk kasus ketiga	49
IV.8	Grafik ΔE_{HL} vs Energi ikat semua kasus	51

<i>DAFTAR GAMBAR</i>	xiv
B.1 File input untuk molekul OH	61
B.2 File input untuk molekul HO ₂	61
B.3 File input untuk molekul NO ₂	62
B.4 File input untuk molekul COOH	62
B.5 File input untuk atom H	63
B.6 File input untuk atom F	63
B.7 File input untuk molekul CH ₃	64
B.8 File input untuk molekul H ₂ O	64
B.9 File input untuk molekul FOH	65
B.10 File input untuk molekul CH ₃ OH	65
B.11 File input untuk molekul H ₂ O ₂	66
B.12 File input untuk molekul HO ₂ F	66
B.13 File input untuk molekul HNO ₂	67
B.14 File input untuk molekul NO ₂ F	67
B.15 File input untuk molekul CH ₃ NO ₂	68
B.16 File input untuk molekul CH ₃ COOH	68
C.1 Output kalkulasi untuk molekul OH	70
D.1 DLE untuk keadaan spin duplet dan kuartet	71
D.2 DLE untuk keadaan spin singlet dan triplet	72

DAFTAR TABEL

I.1	Objek Penelitian	3
II.1	Komponen angular	13
III.1	Agenda dan waktu pelaksanaan penelitian	35
IV.1	Panjang ikatan pada keadaan dasar (bagian 1)	37
IV.2	Panjang ikatan pada keadaan dasar (bagian 2)	38
IV.3	Sudut ikatan pada keadaan dasar (bagian 1)	39
IV.4	Sudut ikatan pada keadaan dasar (bagian 2)	40
E.1	Energi ikat untuk semua kasus	73