

DAFTAR ISI

Halaman Pernyataan	i
Lembaran Pengesahan	ii
Pedoman Penggunaan Skripsi	iv
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	3
I.4 Batasan Masalah	3
I.5 Manfaat	3
II Studi Literatur	5
II.1 Ionisasi	5
II.2 Potensial Ionisasi	5
II.3 Struktur Elektronik	5
II.4 Teori Orbital Molekuler	8
II.4.1 Struktur Elektronik Molekul	8
II.4.2 Interaksi Antar Orbital	10
II.5 Molekul Asetilkolin	14

<i>DAFTAR ISI</i>	xi
II.6 Mekanika Kuantum	14
II.6.1 Persamaan Schrödinger	14
II.6.2 Atom Hidrogen	18
II.6.3 Atom Helium	21
II.7 Density Functional Theory	22
II.8 Program Gaussian09 [®]	28
II.8.1 Jenis Kalkulasi	28
II.8.2 File Input	29
II.8.3 File Output	30
III Metode Penelitian	32
III.1 Model Komputasi	32
III.2 Alur Penelitian	33
III.3 Alur Kalkulasi	34
III.4 Tempat Penelitian	35
III.5 Waktu Penelitian	35
IV Hasil dan Pembahasan	37
IV.1 High Occupied Molekular Orbital	37
IV.2 Struktur Geometris Keadaan Dasar untuk Molekul Sederhana	38
IV.3 Potensial Ionisasi	42
IV.4 Diagram Level Energi	45
IV.5 Kestabilan Molekul Acetylcholine	47
V Kesimpulan dan Saran	51
V.1 Kesimpulan	51
V.2 Saran	51
A Alur Kalkulasi	52
A.1 Ground State Molekul Netral	52
A.2 Ground State Molekul Ionik	53

<i>DAFTAR ISI</i>	xii
B Quantum Spin State	56
C Potensial Ionisasi	61

DAFTAR GAMBAR

II.1	Orbital molekuler pada keadaan dasar.	6
II.2	Orbital overlap	9
II.3	Interaksi dua AO	11
II.4	Interaksi dua AO terhadap r	11
II.5	Bidang simpul orbital atom	11
II.6	Representasi cuping MO yang terbentuk dari dua buah AO.	12
II.7	MO dari dua AO yang sama jenis.	13
II.8	Hibridisasi MO	13
II.9	Model Atom Hidrogen	20
II.10	Atom helium model	21
II.11	Contoh basis set fungsi diffuse.	28
II.12	File input Program Gaussian09 [®] untuk molekul OH.	30
III.1	Model Molekul Ionik	33
III.2	Alur Penelitian.	34
III.3	Alur Kalkulasi.	36
IV.1	High Occupied Molecular Orbital	38
IV.2	Grafik relatif energi versus ΔE_{HL} molekul netral.	41
IV.3	Grafik potensial ionisasi hasil kalkulasi versus eksperimen	44
IV.4	Diagram level energi orbital molekuler	46
IV.5	Grafik rel. energi versus ΔE_{HL} molekul netral H	49
IV.6	Grafik ΔE_{HL} versus potensial ionisasi	49
IV.7	Grafik potensial ionisasi hasil kalkulasi versus ΔE_{HL}	50
A.1	Input kalkulasi untuk molekul netral	54
A.2	Input kalkulasi untuk molekul ionik	55

<i>DAFTAR GAMBAR</i>	xiv
B.1 ELD quantum spin state untuk molekul acetylcholine	57
B.2 ELD quantum spin state untuk molekul ke-2	57
B.3 ELD quantum spin state untuk molekul ke-3	58
B.4 ELD quantum spin state untuk molekul ke-4	58
B.5 ELD quantum spin state untuk molekul ke-5	59
B.6 ELD quantum spin state untuk molekul ke-6	59
B.7 ELD quantum spin state untuk molekul ke-7	60

DAFTAR TABEL

II.1 Struktur file input gaussian09 [©]	29
III.1 Agenda dan waktu pelaksanaan penelitian	35
IV.1 Panjang ikatan pada keadaan dasar.	40
IV.2 Sudut ikatan pada keadaan dasar.	41
C.1 Perhitungan Potensial Ionisasi	61