

## DAFTAR ISI

<b>Halaman Pernyataan</b>	<b>i</b>
<b>Lembaran Pengesahan</b>	<b>ii</b>
<b>Pedoman Penggunaan Skripsi</b>	<b>iv</b>
<b>Surat Pernyataan Orisinalitas</b>	<b>v</b>
<b>Prakata</b>	<b>vi</b>
<b>Lembaran Terima Kasih</b>	<b>vii</b>
<b>Abstrak (versi Bahasa Indonesia)</b>	<b>viii</b>
<b>Abstract (English version)</b>	<b>ix</b>
<b>Daftar Istilah</b>	<b>x</b>
<b>Daftar Singkatan</b>	<b>xii</b>
<b>I Pendahuluan</b>	<b>1</b>
I.1 Latar Belakang . . . . .	1
I.2 Rumusan Masalah . . . . .	3
I.3 Tujuan . . . . .	3
I.4 Batasan Masalah . . . . .	3
I.5 Manfaat . . . . .	4
<b>II Studi Literatur</b>	<b>5</b>
II.1 Reaksi Kimia . . . . .	5
II.1.1 Deskripsi Umum . . . . .	5
II.1.2 Satuan yang Dipakai . . . . .	6

<i>DAFTAR ISI</i>	xiv
II.1.3 Keadaan Ekuilibrium . . . . .	8
II.1.4 Laju Reaksi . . . . .	10
II.1.5 Panas yang Terlibat . . . . .	13
II.2 Energy Level Diagram . . . . .	16
II.2.1 Jalur Reaksi . . . . .	17
II.2.2 Ground State dan Transition State . . . . .	18
II.2.3 Energi Aktivasi dan Faktor Pre-eksponensial . . . . .	19
II.2.4 Konstanta Laju Reaksi Menurut Teori Keadaan Transisi	21
II.3 Struktur Elektronik . . . . .	22
II.3.1 Persamaan Gerak Mekanika Kuantum . . . . .	22
II.3.1.1 Persamaan Schrödinger . . . . .	22
II.3.1.2 Persamaan Schrödinger takbergantung waktu	25
II.3.2 Model Atomik Secara Mekanika Kuantum . . . . .	27
II.3.2.1 Pemodelan atom hidrogen . . . . .	27
II.3.2.2 Pemodelan atom selain hidrogen . . . . .	31
II.4 Density Functional Theory . . . . .	33
II.4.1 Fungsi Gelombang untuk Sistem Banyak-elektron . . .	33
II.4.2 Persamaan Schrödinger untuk sistem $N$ -elektron . . .	35
II.4.3 Penyederhanaan Born-Oppenheimer . . . . .	39
II.4.4 Teorema Hohenberg-Kohn . . . . .	41
II.4.5 Persamaan Kohn-Sham . . . . .	42
II.4.6 Perhitungan Struktur Elektronik . . . . .	45
<b>III Metode Penelitian</b>	<b>49</b>
III.1 Model Komputasi . . . . .	49
III.2 Langkah Kerja . . . . .	51
III.3 Aktivitas Penelitian . . . . .	53
III.3.1 Tempat . . . . .	53
III.3.2 Agenda dan Waktu . . . . .	53

<i>DAFTAR ISI</i>	xv
<b>IV Hasil dan Pembahasan</b>	<b>54</b>
IV.1 Rancangan Jalur Isomerisasi . . . . .	54
IV.2 Struktur Geometris . . . . .	58
IV.2.1 Ground State . . . . .	58
IV.2.2 Transition State . . . . .	59
IV.2.3 Intermediate State . . . . .	61
IV.3 Energy Level Diagram . . . . .	63
IV.3.1 Berbasis Energi Elektronik Total . . . . .	63
IV.3.2 Efek Koreksi Termal pada Temperatur Ruang . . . . .	63
IV.3.3 Efek Koreksi Termal pada Temperatur Tinggi . . . . .	64
IV.4 Parameter Arrhenius . . . . .	68
IV.4.1 Energi Aktivasi . . . . .	68
IV.4.2 Faktor Pre-eksponensial . . . . .	70
IV.5 Konstanta Laju Reaksi . . . . .	70
<b>V Kesimpulan dan Saran</b>	<b>74</b>
V.1 Kesimpulan . . . . .	74
V.2 Saran . . . . .	75
<b>Bibliografi</b>	<b>76</b>
<b>A Rutin Kalkulasi</b>	<b>79</b>
A.1 Rutin 1: Optimisasi ground state . . . . .	79
A.2 Rutin 2: Optimisasi Secara Parsial . . . . .	81
A.3 Rutin 3: Optimisasi Transition State . . . . .	81
<b>B ELD Quantum Spin State</b>	<b>83</b>
<b>C Struktur Geometris</b>	<b>84</b>