

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN	i
KATA PENGANTAR	ii
DAFTAR ISI.....	iv
DAFTAR GAMBAR	vi
DAFTAR TABEL	vii
DAFTAR LAMPIRAN.....	viii
DAFTAR SIMBOL.....	ix
ABSTRAK.....	x
<i>ABSTRACT</i>	xi
BAB I PENDAHULUAN.....	1
I.1. Latar Belakang.....	1
I.2. Rumusan Masalah.....	3
I.3. Tujuan Penelitian	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	4
II.1. Gas Volatil Organik.....	4
II.2. Heterostruktur Grafena Boron Nitrida	6
II.3. Adsorpsi	7
II.4. Kimia Komputasi.....	8
II.5. <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	9
II.6. Pemodelan Sistem Periodik Zat Padat	11
II.6.1 Sel Unit dan Zona Brillouin.....	12
II.6.2 <i>Planewave Expansion</i>	13
II.6.3 Energi <i>Cutoff</i>	14
II.7. Quantum ESPRESSO	14
BAB III METODOLOGI.....	16
III.1. Waktu dan Tempat Pelaksanaan.....	16
III.2. Alat dan Bahan	16
III.2.1 Alat	16
III.2.2 Bahan	16
III.3. Variabel Penelitian	16
III.3.1 Variabel Tetap	16
III.3.2 Variabel Bebas	17

III.3.3	Variabel Terukur.....	17
III.4.	Prosedur Penelitian	17
III.4.1	Optimasi Parameter.....	17
III.4.2	Optimasi Reseptor	20
III.4.3	Optimasi Ligan	21
III.4.4	Optimasi Ligan...Reseptor	22
BAB IV	HASIL DAN PEMBAHASAN	28
IV.1.	Optimasi Parameter.....	28
IV.2.	Optimasi Reseptor	37
IV.3.	Optimasi Ligan	40
IV.4.	Optimasi Kompleks	43
BAB V	PENUTUP	50
V.1.	Kesimpulan	50
V.2.	Saran	50
DAFTAR PUSTAKA.....		51
LAMPIRAN		54