

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iv
KATA PENGANTAR	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	4
I.3 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Sifat fisika dan kimia aktinium	5
II.1.2 Solvasi ion Ac^{3+} dalam air secara eksperimen	6
II.1.3 Kajian teoritis solvasi ion Ac^{3+} dalam air	7
II.2 Perumusan Hipotesis	10
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	10
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	11
II.2.3 Rancangan penelitian	12
BAB III METODE PENELITIAN	14
III.1 Alat dan Bahan	14
III.1.1 Perangkat keras	14
III.1.2 Perangkat lunak	14
III.1.3 Sistem simulasi	14
III.2 Cara Kerja	14
III.2.1 Protokol simulasi	14
III.2.2 Analisis trajektori	15
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	16
IV.1 Analisis Sifat Struktural Solvasi Ion Ac^{3+} dalam Air	16
IV.1.1 Analisis fungsi distribusi radial (RDF)	16
IV.1.2 Analisis distribusi bilangan koordinasi (CND)	19
IV.1.3 Analisis fungsi distribusi angular (ADF)	23
IV.1.4 Analisis muatan parsial Mulliken	26
IV.2 Analisis Sifat Dinamika Solvasi Ion Ac^{3+} dalam Air	27
IV.2.1 Analisis waktu tinggal rata-rata ligan (MRT)	27
IV.2.2 Analisis vibrasi ulur Ac^{3+} - H_2O kulit solvasi pertama	31
IV.2.3 <i>Local density corrected three-body distribution functions</i>	32
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	35
V.1 Kesimpulan	35
V.2 Saran	35
DAFTAR PUSTAKA	36

LAMPIRAN

40