

**TESIS**

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER MEKANIKA  
KUANTUM/MEKANIKA MOLEKULER (DM MK/MM) PADA SIFAT  
STRUKTUR DAN DINAMIKA SOLVASI KARBON DIOKSIDA DALAM  
SISTEM NH<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O**

***SIMULATION OF QUANTUM MECHANICS/MOLECULAR MECHANICS  
MOLECULAR DYNAMICS (QM/MM MD) ON THE STRUCTURE AND  
DYNAMIC PROPERTIES OF CARBON DIOXIDE SOLVATION IN THE  
NH<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O SYSTEM***



LA ODE MUHAMAD IQBAL  
22/501369/PPA/06387

**PROGRAM STUDI MAGISTER KIMIA  
DEPARTEMEN KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS GADJAH MADA  
YOGYAKARTA**

**2024**

**TESIS**

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER MEKANIKA  
KUANTUM/MEKANIKA MOLEKULER (DM MK/MM) PADA SIFAT  
STRUKTUR DAN DINAMIKA SOLVASI KARBON DIOKSIDA DALAM  
SISTEM NH<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O**

***SIMULATION OF QUANTUM MECHANICS/MOLECULAR MECHANICS  
MOLECULAR DYNAMICS (QM/MM MD) ON THE STRUCTURE AND  
DYNAMIC PROPERTIES OF CARBON DIOXIDE SOLVATION IN THE  
NH<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O SYSTEM***

Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat memperoleh derajat  
*Master of Science* Ilmu Kimia



LA ODE MUHAMAD IQBAL  
22/501369/PPA/06387

**PROGRAM STUDI MAGISTER KIMIA  
DEPARTEMEN KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS GADJAH MADA  
YOGYAKARTA**

**2024**

## HALAMAN PENGESAHAN

### TESIS

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER MEKANIKA  
KUANTUM/MEKANIKA MOLEKULER (DM MK/MM) PADA SIFAT  
STRUKTUR DAN DINAMIKA SOLVASI KARBON DIOKSIDA DALAM  
SISTEM NH<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O**

Telah dipersiapkan dan disusun oleh:


LA ODE MUHAMAD IQBAL  
22/501369/PPA/06387

Telah dipertahankan di depan Tim Penguji  
Pada tanggal 12 Juni 2024

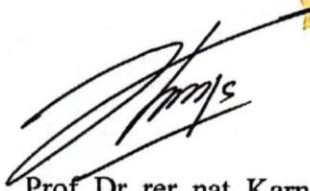
Susunan Tim Penguji



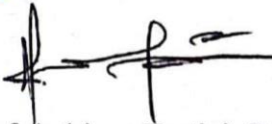
Dr. rer. nat. Niko Prasetyo, S.Si., M.Sc.  
Pembimbing I



Prof. Drs. Mudasir, M.Eng., Ph.D.  
Penguji I




Prof. Dr. rer. nat. Karna Wijaya, M.Eng.  
Pembimbing II



Prof. Indriana Kartini, S.Si., M.Si., Ph.D.  
Penguji II

Tesis ini telah diterima sebagai salah satu persyaratan  
untuk memperoleh gelar *Master of Science*



Prof. Tri Joko Raharjo, S.Si., M.Si., Ph.D.  
Ketua Program Studi S2 Kimia

Mengetahui,  
dan Dekan FMIPA UGM  
Wakil Dekan Bidang Pendidikan, Pengajaran  
dan Kemahasiswaan



Prof. Drs. Roto, M.Eng., Ph.D.  
NIP. 196711171993031020