

DAFTAR ISI

HALAMAN SAMPUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	
Error! Bookmark not defined.	
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	ii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	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 Simulasi dinamika molekuler	5
II.1.2 Simulasi dinamika molekuler QMCF	7
II.1.3 Persamaan Hartree-Fock	12
II.1.4 Solvasi CO ₂ dalam pelarut H ₂ O	14
II.1.5 Solvasi CO ₂ dalam pelarut NH ₃	17
II.1.6 Solvasi CO ₂ dalam pelarut H ₂ O-amina	19
II.1.7 Analisis struktur dan dinamika solvasi	21
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	23
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	23
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	23
II.2.3 Rancangan penelitian	24
BAB III METODE PENELITIAN	25
III.1 Alat	25
III.1.1 Perangkat keras	25
III.1.2 Perangkat lunak	25
III.2 Bahan	25
III.3 Prosedur Kerja	25
III.4 Analisis Struktur dan Dinamika Solvasi	26
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	28
IV.1 Validasi Metode	28
IV.2 Analisis Struktur Solvasi CO ₂ di dalam Pelarut Campuran Air- Amoniak	30
IV.2.1 Analisis fungsi distribusi radial (RDF)	30
IV.2.2 Analisis distribusi bilangan koordinasi (CND)	34
IV.2.3 Analisis distribusi radial angular (ARD)	38

IV.2.4 Analisis fungsi distribusi angular (ADF)	41
IV.2.5 Analisis parsial muatan Mulliken	43
IV.3 Analisis Dinamika Solvasi CO ₂ di dalam Pelarut Campuran Air- Amoniak	46
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	49
V.1 Kesimpulan	49
V.2 Saran	49
DAFTAR PUSTAKA	50
LAMPIRAN	54