

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN	iii
HALAMAN MOTTO DAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
INTISARI	xii
ABSTRACT	xiii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	5
I.3 Manfaat Penelitian	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	6
II.1 Tinjauan Pustaka	6
II.1.1 Simulasi dinamika molekuler <i>Quantum Mechanics/Molecular Mechanics</i> (QM/MM)	6
II.1.2 Kajian eksperimen solvasi Ba ²⁺ dalam pelarut air	10
II.1.3 Kajian teoritis solvasi Ba ²⁺ dalam pelarut air	11
II.2 Perumusan Hipotesis	13
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	13
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	14
II.2.3 Rancangan penelitian	14
BAB III METODE PENELITIAN	16
III.1 Alat dan Bahan	16
III.1.1 Perangkat keras	16
III.1.2 Perangkat lunak	16
III.1.3 Sistem simulasi	16
III.2 Cara Kerja	16
III.2.1 Validasi metode kimia komputasi	16
III.2.2 Protokol simulasi	17
III.2.3 Analisis trajektori simulasi dinamika molekuler QM/MM	18
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	19
IV.1 Validasi Metode Kimia Komputasi	19
IV.2 Analisis Struktur Solvasi Ba ²⁺ dalam Air	21
IV.2.1 Analisis fungsi distribusi radial (RDF)	21
IV.2.2 Analisis distribusi bilangan koordinasi (CND)	24
IV.2.3 Analisis distribusi fungsi sudut angular (ADF)	28
IV.2.4 Analisis <i>local density corrected three-body distribution functions</i>	30
IV.2.5 Analisis muatan parsial Mulliken	32



IV.3 Analisis Sifat Dinamika Solvasi Ba ²⁺ dalam Air	33
IV.3.1 Analisis waktu tinggal rata-rata ligan (MRT) dalam kulit solvasi pertama dan kedua	33
IV.3.2 Analisis vibrasi ulur atom pusat-ligan kulit solvasi pertama	36
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	38
V.1 Kesimpulan	38
V.2 Saran	38
DAFTAR PUSTAKA	39