

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR LAMPIRAN	ix
INTISARI	x
ABSTRACT	xi
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	2
I.3 Manfaat Penelitian	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	4
II.1 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 Prinsip dasar simulasi dinamika molekuler	4
II.1.2 Simulasi 2d-QM/MM untuk antarmuka padatan/cairan	6
II.1.3 Antarmuka alumina-air	8
II.1.4 SCC-DFTB	10
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	12
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	12
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	12
II.2.3 Rancangan penelitian	12
BAB III METODE PENELITIAN	14
III.1 Bahan	14
III.2 Peralatan	14
III.3 Prosedur Penelitian	14
III.3.1 Ekuilibrasi dan Simulasi SCC-DFTB MD	14
III.3.2 Analisis fungsi distribusi radial satu dimensi (1d-RDF)	15
III.3.3 Analisis orientasi molekul air	15
III.3.4 Analisis disosiasi air	15
III.3.5 Analisis vibrasi molekul	16
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	17
IV.1 Struktur Permukaan (110) γ -Al ₂ O ₃	17
IV.2 Struktur Antarmuka (110) γ -Al ₂ O ₃ /vakum	18
IV.3 Struktur Antarmuka (110) γ -Al ₂ O ₃ /H ₂ O	19
IV.4 Analisis Fungsi Distribusi Radial 1-Dimensi	20
IV.5 Orientasi Molekul Air pada Permukaan (110) γ -Al ₂ O ₃	22
IV.6 Adsorpsi dan Disosiasi Air pada Permukaan (110) γ -Al ₂ O ₃	24
IV.7 Analisis Vibrasi Molekul	27
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	29
V.1 Kesimpulan	29
V.2 Saran	29

DAFTAR PUSTAKA	30
LAMPIRAN	36