

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iii
HALAMAN MOTTO DAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR GAMBAR	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 molekular	5
II.1.2. Mekanika kuantum/mekanika molekular (QM/MM)	8
II.1.3. Kajian eksperimen HgCl ₂ dalam air	9
II.1.4. Kajian teoritis HgCl ₂ dalam air	11
II.2. Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	14
II.2.1. Perumusan hipotesis 1	14
II.2.2. Perumusan hipotesis 2	15
II.2.3. Rancangan penelitian	15
BAB III METODE PENELITIAN	17
III.1. Alat Penelitian	17
III.2. Bahan Penelitian	17
III.3. Prosedur Penelitian	17
III.3.1. Validasi metode	17
III.3.2. Protokol simulasi	18
III.3.3. Analisis trajektori struktur dan dinamika solvasi HgCl ₂ dalam air	19
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	20
IV.1. Validasi Metode Kimia Komputasi	20
IV.2. Analisis Struktur Solvasi HgCl ₂ dalam air	22
IV.2.1. Analisis fungsi distribusi radial	22
IV.2.2. Analisis distribusi bilangan koordinasi	25

IV.2.3. Analisis distribusi radial angular	28
IV.2.4. Analisis distribusi fungsi sudut angular	29
IV.2.5. Analisis muatan parsial Mulliken	31
IV.3. Analisis Sifat Dinamika Solvasi HgCl ₂ dalam air	33
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	36
V.1. Kesimpulan	36
V.2. Saran	36
DAFTAR PUSTAKA	37
LAMPIRAN	43