

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN SKRIPSI	ii
SURAT PERNYATAAN	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR LAMPIRAN	xi
INTISARI	xii
ABSTRACT	xiii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	4
II.1 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 α -alumina (Al_2O_3)	4
II.1.2 Simulasi Dinamika Molekul	8
II.2 Perumusan Hipotesis	10
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	10
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	11
BAB III METODE PENELITIAN	13
III.1 Alat dan Bahan	13
III.1.1 Perangkat keras	13
III.1.2 Perangkat lunak	13
III.1.3 Sistem simulasi	13
III.2 Cara Kerja	14
III.2.1 Protokol simulasi	14
III.2.2 Analisis	15
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	16
IV.1 Analisis Perubahan Struktur Alumina	16
IV.2 Analisis RDF Oksigen dan Hidrogen Air pada Permukaan Alumina dalam Sistem Alumina/Air	17
IV.2.1 Analisis RDF oksigen-air (permukaan alumina) dalam sistem alumina/air	17
IV.2.2 Analisis RDF hidrogen air pada permukaan alumina sistem alumina/air	21
IV.3 Analisis RDF Oksigen-Air pada Permukaan Alumina dalam Sistem Ion Divalen Ca^{2+} dan Mg^{2+}	23
IV.3.1 Analisis RDF oksigen-air (permukaan alumina) dalam sistem ion divalen Ca^{2+}	23
IV.3.2 Analisis RDF oksigen-air (permukaan alumina) dalam sistem ion divalen Mg^{2+}	26

IV.4 Analisis RDF Hidrogen-air pada Permukaan Alumina dalam Sistem Ion Divalen Ca^{2+} dan Mg^{2+}	28
IV.4.1 Analisis RDF hidrogen pada sistem ion divalen Ca^{2+}	28
IV.4.2 Analisis RDF hidrogen pada sistem ion divalen Mg^{2+}	30
IV.5 Analisis Oksigen Air di Sekeliling Ca^{2+} dan Mg^{2+}	32
IV.5.1 Analisis oksigen di sekeliling ion Ca^{2+}	32
IV.5.2 Analisis oksigen di sekeliling ion Mg^{2+}	36
IV.6 Analisis Hidrogen Air di Sekeliling Ion Cl^-	39
IV.6.1 Analisis hidrogen air di sekeliling ion Cl^- pada sistem ion divalen Ca^{2+}	39
IV.6.2 Analisis hidrogen air di sekeliling ion Cl^- pada sistem ion divalen Mg^{2+}	43
IV.7 Analisis Sudut θ pada Permukaan Alumina	46
IV.7.1 Analisis sudut θ pada permukaan alumina/air	46
IV.7.2 Analisis sudut θ pada alumina/air sistem ion divalen Ca^{2+}	47
IV.7.3 Analisis sudut θ pada alumina/air sistem ion divalen Mg^{2+}	49
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	52
V.1 Kesimpulan	52
V.2 Saran	52
DAFTAR PUSTAKA	53
lampiran	57