

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN JUDUL</b>	<b>i</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b>	<b>ii</b>
<b>PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI</b>	<b>iii</b>
<b>KATA PENGANTAR</b>	<b>iv</b>
<b>DAFTAR ISI</b>	<b>v</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	<b>vii</b>
<b>DAFTAR TABEL</b>	<b>viii</b>
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b>	<b>ix</b>
<b>INTISARI</b>	<b>x</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xi</b>
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	6
I.3 Manfaat Penelitian	6
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS</b>	<b>7</b>
II.1 Tinjauan Pustaka	7
II.1.1 Sifat fisika dan kimia galium	7
II.1.2 Hidrasi ion Ga <sup>3+</sup> dalam air secara eksperimen	9
II.1.3 Kajian teoritis hidrasi ion Ga <sup>3+</sup> dalam air	11
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	16
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	17
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	18
II.2.3 Rancangan penelitian	18
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	<b>20</b>
III.1 Alat dan Bahan	20
III.1.1 Perangkat keras	20
III.1.2 Perangkat lunak	20
III.2 Prosedur Kerja	20
III.2.1 Pemilihan metode perhitungan kimia komputasi	20
III.2.2 Protokol simulasi	21
III.2.3 Analisis trajektori simulasi DM-QMCF	22
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	<b>25</b>
IV.1 Pemilihan Metode	25
IV.2 Analisis Trajektori Simulasi DM QCMF	25
IV.2.1 Analisis fungsi distribusi radial (RDF) hidrasi ion Ga <sup>3+</sup>	26
IV.2.2 Analisis distribusi bilangan koordinasi (CND) hidrasi ion Ga <sup>3+</sup>	30
IV.2.3 Analisis fungsi distribusi angular (ADF) hidrasi ion Ga <sup>3+</sup>	33
IV.2.4 Analisis muatan parsial Mulliken	35
IV.2.5 Analisis dinamika hidrasi ion Ga <sup>3+</sup>	37



UNIVERSITAS  
GADJAH MADA

**Struktur Hidrasi Dan Dinamika Ion Ga<sup>3+</sup> Dalam Pelarut Air: Simulasi Dinamika Molekul Quantum Mechanical Charge Field (QMCF)**

Fadhiah Sarita Rustam, Dr.rer.nat Niko Prasetyo, S.Si., M.Sc.

Universitas Gadjah Mada, 2025 | Diunduh dari <http://etd.repository.ugm.ac.id/>

<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b>	<b>42</b>
V.1 Kesimpulan	42
V.2 Saran	42
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	<b>43</b>
<b>LAMPIRAN</b>	<b>50</b>