

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iv
KATA PENGANTAR.....	v
DAFTAR ISI.....	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT.....	xii
BAB I PENDAHULUAN.....	1
I.1 Latar Belakang.....	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1. Tinjauan Pustaka.....	5
II.1.1 Simulasi dinamika molekuler klasik	5
II.1.2 Teori Medan Gaya	5
II.1.4 Sifat fisika dan kimia magnesium	9
II.1.5 Hidrasi ion Mg^{2+} dalam pelarut air secara eksperimen ...	10
II.1.6 Kajian teoritis hidrasi ion Mg^{2+} dalam pelarut air.....	11
II.2 Perumusan Hipotesis	11
II.3 Rancangan Penelitian.....	12
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 Bahan Kajian.....	13
III.2 Prosedur Penelitian	13
III.2.1 <i>Scanning Potential Energy Surface</i> (PES) Mg^{2+} -air.....	14
III.2.2 Penyusunan potensial 2 badan sistem Mg-air	14
III.2.4 Protokol simulasi dinamika molekuler klasik.....	15
III.2.5 Analisis trajektori.....	15
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	17
IV.1 Penentuan metode komputasi terbaik	17
IV.2 <i>Scanning Potential Energy Surface</i> (PES).....	20
IV.3 Analisis fungsi distribusi radial (RDF).....	24
IV.3 Analisis distribusi bilangan koordinasi (CND).....	27
IV.4 Analisis distribusi fungsi sudut angular (ADF)	31
IV.5 Analisis sifat dinamika hidrasi Mg^{2+} dalam air	33
IV.6 Analisis vibrasi ulur Mg- H_2O pada kulit hidrasi pertama	35
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	38

V.1	Kesimpulan	38
V.2	Saran	38
DAFTAR PUSTAKA.....		39
LAMPIRAN.....		42