

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	1
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI DAN PENGGUNAAN KECERDASAN ARTIFISIAL GENERATIF	iii
HALAMAN 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	5
I.3 Manfaat Penelitian	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	6
II.1 Tinjauan Pustaka	6
II.1.1 Ion radioaktif Np^{4+}	6
II.1.2 Kajian eksperimen hidrasi ion Np^{4+}	7
II.1.3 Kajian teoritis simulasi hidrasi ion Np^{4+}	8
II.1.4 Simulasi dinamika molekuler	9
II.2 Perumusan Hipotesis	14
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	14
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	15
II.2.3 Rancangan penelitian	16
BAB III METODE PENELITIAN	17
III.1 Peralatan	17
III.1.1 Perangkat keras	17
III.1.2 Perangkat lunak	17
III.1.3 Sistem simulasi	17
III.2 Prosedur Penelitian	17
III.2.1 Validasi metode	17
III.2.2 Protokol simulasi dinamika molekuler MM	18
III.2.3 Protokol simulasi dinamika molekuler HF-DKH2/MM	18
III.2.4 Analisis trajektori	19
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	20
IV.1 Validasi Metode Kimia Komputasi	20
IV.2 Analisis Sifat Struktural Np^{4+} dalam Air	22
IV.2.1 Analisis fungsi distribusi radial	22
IV.2.2 Analisis distribusi bilangan koordinasi	27
IV.2.3 Analisis fungsi distribusi sudut	32

IV.2.4 Analisis local density corrected three-body distribution function	37
IV.2.5 Analisis muatan parsial Mulliken	40
IV.3 Analisis Dinamika Hidrasi Ion Np^{4+} dalam Air	41
IV.3.1 Analisis waktu tinggal rata-rata ligan	41
IV.3.2 Analisis vibrasi ulur kulit hidrasi pertama	45
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	48
V.1 Kesimpulan	48
V.2 Saran	48
DAFTAR PUSTAKA	49
LAMPIRAN	53

DAFTAR TABEL

Tabel IV.1 Energi ikat Np^{4+} - H_2O dalam kompleks $[\text{Np}(\text{H}_2\text{O})_n]^{4+}$ hasil optimasi geometri HF, HF SARC-DKH-TZVP, dan RI-MP2 SARC-DKH-TZVP	21
Tabel IV.2 Jarak Np^{4+} -O dalam kompleks $[\text{Np}(\text{H}_2\text{O})_n]^{4+}$ hasil optimasi geometri HF, HF SARC-DKH-TZVP, dan RI-MP2 SARC-DKH-TZVP	21
Tabel IV.3 Nilai karakterisasi RDF untuk Np^{4+} dalam air dari simulasi dinamika HF-DKH2/MM	23
Tabel IV.4 Nilai karakterisasi RDF untuk Np^{4+} dalam air dari simulasi dinamika molekuler MM	24
Tabel IV.5 Perbandingan puncak sudut O- Np^{4+} -O dari simulasi dinamika molekuler MM dan HF-DKH2/MM serta referensi geometri	33
Tabel IV.6 Waktu tinggal rata-rata, τ , dalam satuan ps dan data dinamika lainnya untuk ion Np^{4+} dalam air pada $t = 0,0$ dan $0,5$ ps	42

DAFTAR GAMBAR

Gambar II. 1	Kotak simulasi dinamika molekuler QMCF (Frick <i>et al.</i> , 2009)	11
Gambar IV.1	Fungsi distribusi radial dan integrasi untuk Np^{4+} dalam air dari simulasi dinamika molekuler HF-DKH2/MM	25
Gambar IV.2	Fungsi distribusi radial dan integrasi untuk Np^{4+} dalam air dari simulasi dinamika molekuler MM	25
Gambar IV.3	Distribusi bilangan koordinasi kulit hidrasi pertama, kedua, dan ketiga sistem Np^{4+} pada simulasi dinamika molekuler HF-DKH2/MM	28
Gambar IV.4	Distribusi bilangan koordinasi kulit hidrasi pertama, kedua, dan ketiga sistem Np^{4+} pada simulasi dinamika molekuler MM	29
Gambar IV.5	Visualisasi interaksi ikatan hidrogen (garis putus-putus) yang terjadi di kulit hidrasi pertama (merah), kedua (merah muda), dan ketiga (abu-abu)	30
Gambar IV.6	Perubahan bilangan koordinasi (a) kulit hidrasi pertama, (b) kulit hidrasi kedua, dan (c) kulit hidrasi ketiga selama waktu simulasi hidrasi Np^{4+} pada simulasi dinamika molekuler HF-DKH2/MM	31
Gambar IV.7	Perubahan bilangan koordinasi (a) kulit hidrasi pertama, (b) kulit hidrasi kedua, dan (c) kulit hidrasi ketiga selama waktu simulasi hidrasi Np^{4+} dengan simulasi dinamika molekuler MM	31
Gambar IV.8	Hasil analisis ADF interaksi sudut antara O- Np^{4+} -O simulasi dinamika molekuler HF-DKH2/MM	33
Gambar IV.9	Struktur geometri <i>Gyrolongated Square Antiprism</i> (GySA), atom neptunium (biru), atom oksigen (merah)	34
Gambar IV.10	Visualisasi struktur $[\text{Np}(\text{H}_2\text{O})_9]^{4+}$ dalam geometri <i>Gyrolongated Square Antiprism</i> (GySA)	35
Gambar IV.11	Hasil analisis ADF interaksi sudut antara O- Np^{4+} -O simulasi dinamika molekuler MM	35
Gambar IV.12	Skema reorganisasi struktur pelarut lokal yang ditentukan menggunakan <i>local corrected three-body distribution functions</i> $g(3)\text{X-A-B}(s,r,s)$	38
Gambar IV.13	Kurva <i>local corrected three-body distribution functions</i> $\text{Np}^{4+}\text{-H}_2\text{O}$ pada simulasi dinamika molekuler HF-DKH2/MM	38
Gambar IV.14	Muatan parsial Mulliken ion Np^{4+} dalam air dimana garis merah menunjukkan rata-rata fluktuasi muatan total	40
Gambar IV.15	Perubahan jarak $\text{Np}^{4+}\text{-H}_2\text{O}$ selama simulasi pada kulit hidrasi pertama, kedua, dan ketiga simulasi dinamika molekuler HF-DKH2/MM	44
Gambar IV.16	Spektra vibrasi ulur $\text{Np}^{4+}\text{-H}_2\text{O}$ pada kulit hidrasi pertama simulasi dinamika molekuler HF-DKH2/MM	46
Gambar IV.17	Spektra vibrasi ulur $\text{Np}^{4+}\text{-H}_2\text{O}$ pada kulit hidrasi pertama simulasi dinamika molekuler MM	47

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 File input perhitungan energi ikat Np^{4+} - H_2O dengan ORCA 6.0	53
Lampiran 2 File input simulasi dinamika molekuler MM	54
Lampiran 4 File input simulasi dinamika molekuler HF-DKH2/MM	57