

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	iii
PERNYATAAN	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	3
I.3 Manfaat	3
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	4
II.1 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 Sifat fisika dan kimia rhodium	4
II.1.2 Sifat fisika dan kimia amonia	5
II.1.3 Kajian solvasi rhodium dalam berbagai pelarut	5
II.1.4 Metode <i>ab initio</i> Hartree-Fock dan himpunan basis	6
II.1.5 Simulasi dinamika molekul QMCF	10
II.1.6 Analisis trajektori simulasi dinamika molekul	15
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	16
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	16
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	17
BAB III. METODE PENELITIAN	18
III.1 Peralatan	18
III.1.1 Perangkat keras	18
III.1.2 Perangkat lunak	18
III.2. Prosedur penelitian	18
III.2.1 Validasi metode	18
III.2.2 Protokol simulasi	18
III.2.3 Analisis trajektori simulasi dinamika molekul QMCF	19
BAB IV. HASIL DAN PEMBAHASAN	20
IV.1 Validasi Metode Kimia Komputasi	20
IV.2 Scan Energi Kinetik	21
IV.3 Analisis Struktur Solvasi Ion Rh ³⁺ dalam Amonia Cair	23
IV.3.1 Analisis fungsi distribusi jarak/ RDF	23
IV.3.2 Analisis ditribusi bilangan koordinasi/ CND	26
IV.3.3 Analisis fungsi distribusi sudut/ADF	28
IV.4 Analisis Sifat Dinamika Solvasi Ion Rh ³⁺ dalam Amonia Cair	30
IV.4.1 Analisis waktu tinggal rata-rata ligan dalam kulit solvasi pertama dan kedua	31
IV.4.2 Analisis vibrasi ulur atom pusat - ligan	

kulit solvasi pertama	34
BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN	36
V.1 Kesimpulan	36
V.2 Saran	36
DAFTAR PUSTAKA	37