

DAFTAR ISI

HALAMAN SAMPUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iii
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR TABEL	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xii
DAFTAR SINGKATAN	xiii
DAFTAR ISTILAH	xiv
DAFTAR PUBLIKASI	xv
INTISARI	xvi
ABSTRACT	xvii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	5
I.3 Manfaat Penelitian	6
I.4 Keaslian dan Kebaruan Penelitian	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	9
II.1 Tinjauan Pustaka	9
II.1.1 Karakterisasi solvasi ion logam	9
II.1.2 Ion logam transisi dalam pelarut amonia dan air	10
II.1.3 Peranan ion Cu dalam sistem kimia dan biologi	11
II.1.4 Solvasi ion Cu^{2+} dan Cu^+ dalam pelarut air dan amonia	13
II.1.5 Interaksi non-ikatan	16
II.1.6 Potensial interaksi dan model pelarut	17
II.1.7 Konsep dan perkembangan simulasi dinamika molekul	19
II.1.8 Simulasi dinamika molekul QMCF	26
II.1.9 Analisis trajektori simulasi dinamika molekul	34
II.1.10 Analisis <i>natural bond orbital</i> (NBO)	36
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	37
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	37
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	39
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	41
II.2.4 Perumusan hipotesis 4	42
II.2.5 Perumusan hipotesis 5	43
II.2.6 Rancangan penelitian	44
BAB III METODE PENELITIAN	48
III.1 Peralatan	48
III.1.1 Perangkat lunak	48
III.1.2 Perangkat keras	48
III.2 Bahan	48
III.3 Lokasi Penelitian	49

III.4 Tahap Penelitian	49
III.4.1 Pemilihan metode	49
III.4.2 Protokol simulasi	50
III.4.3 Analisis trajektori simulasi DM QMCF	51
BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	53
IV.1 Pemilihan Metode	53
IV.2 Analisis Trajektori Simulasi DM QMCF ion Cu^{2+}	55
IV.2.1 Analisis struktur dan solvasi preferensial ion Cu^{2+}	55
IV.2.2 Analisis dinamika solvasi ion Cu^{2+}	63
IV.3 Analisis Trajektori Simulasi DM QMCF ion Cu^+	71
IV.3.1 Analisis struktur dan solvasi preferensial ion ion Cu^+	71
IV.3.2 Analisis dinamika solvasi ion Cu^+	79
IV.4 Perbandingan sistem ion Cu^{2+} dan Cu^+ hasil simulasi DM QMCF	87
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	91
V.1 Kesimpulan	91
V.2 Saran	92
DAFTAR PUSTAKA	93
LAMPIRAN	100