

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN	iii
KATA PENGANTAR	iv
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR LAMPIRAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan	4
I.3 Manfaat	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Pengertian dan bentuk fase Titania (TiO ₂)	5
II.1.2 Material kristal TiO ₂ tersulfasi [TiO ₂ /SO ₄ ²⁻]	10
II.1.3 Analisis TiO ₂ dengan DFTB+	13
II.1.4 Simulasi dinamika molekul	16
II.1.5 Termostat berendsen	18
II.1.6 DFTB/MD	19
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	19
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	19
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	20
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	20
II.2.4 Rancangan penelitian	21
BAB III METODE PENELITIAN	22
III.1 Material	22
III.2 Prosedur	22
III.2.1 Preparasi material TiO ₂	22
III.2.2 Running material TiO ₂ dengan DFTB+	24
III.2.3 Optimasi geometri material TiO ₂	25

III.2.4 Simulasi molekul tahap equilibrasi 10 ps	25
III.2.5 Simulasi molekul tahap 20 ps	26
III.2.6 Analisis <i>Radial Distribution Function</i> (RDF)	26
III.2.7 Analisis jumlah ikatan atom	26
III.2.8 Analisis vibrasi adsorpsi	27
III.2.9 Analisis geometri molekul dengan VMD dan VESTA	27
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	28
IV.1 Simulasi Tahap Equilibrasi TiO ₂ dengan H ₂ SO ₄	28
IV.2 Simulasi Molekul TiO ₂ dengan H ₂ SO ₄ 20 ps	37
IV.3 Usulan Mekanisme Adsorpsi dan Struktur TiO ₂ /SO ₄ ²⁻	47
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	50
V.1 Kesimpulan	50
V.2 Saran	50
DAFTAR PUSTAKA	51
LAMPIRAN	56