

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN JUDUL</b>	<b>ii</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b>	<b>iii</b>
<b>PERNYATAAN</b>	<b>iv</b>
<b>HALAMAN PERSEMBAHAN</b>	<b>v</b>
<b>PRAKATA</b>	<b>vi</b>
<b>DAFTAR ISI</b>	<b>vii</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	<b>ix</b>
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b>	<b>x</b>
<b>INTISARI</b>	<b>xi</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xii</b>
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	3
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS</b>	<b>4</b>
II.1 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 Kristalografi	4
II.1.2 Senyawa yttrium oksida	6
II.1.3 Simulasi dinamika molekul	9
II.1.4 <i>Self-consistent charge density functional tight-binding</i>	12
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	13
II.2.1 Perumusan hipotesis I	13
II.2.2 Perumusan hipotesis II	13
II.2.3 Rancangan penelitian	13
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	<b>15</b>
III.1 Materi Penelitian dan Alat	15
III.1.1 Materi penelitian	15
III.1.2 Alat	15
III.2 Prosedur	15
III.2.1 Pemodelan $\alpha$ -Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub> dan permukaan $\alpha$ -Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (110)	15
III.2.2 Simulasi dinamika molekul permukaan $\alpha$ -Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (110)-H <sub>2</sub> O	16
III.2.3 Analisis	17
<b>BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN</b>	<b>18</b>
IV.1 Pemodelan Struktur $\alpha$ -Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	18
IV.2 Pemodelan dan Simulasi MD Permukaan $\alpha$ -Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (110)	19
IV.3 Interaksi $\alpha$ -Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (110)-H <sub>2</sub> O	20
IV.4 Adsorpsi dan Disosiasi H <sub>2</sub> O pada Permukaan Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (110)	22
IV.4.1 Pembentukan ikatan Y pada permukaan $\alpha$ -Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub> dan O dari H <sub>2</sub> O	24
IV.4.2 Pembentukan ikatan H dari H <sub>2</sub> O dengan O pada permukaan	26
IV.5 Analisis <i>Radial Distribution Function</i>	27

	IV.6 Analisis Vibrasi Molekul	29
<b>BAB V</b>	<b>KESIMPULAN</b>	<b>31</b>
	V.1 Kesimpulan	31
	V.2 Saran	31
	<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	<b>32</b>
	<b>LAMPIRAN</b>	<b>37</b>