

DAFTAR ISI

PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR LAMPIRAN	ix
DAFTAR SINGKATAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	2
I.3 Manfaat Penelitian	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	4
II.1 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 Sifat kimia dan fisika logam kalsium dan amoniak	4
II.1.2 Struktur solvasi ion Ca^{2+} dalam pelarut amoniak cair	5
II.1.3 Struktur solvasi ion Ca^{2+} dalam pelarut air-amoniak	6
II.1.4 Struktur solvasi ion Ca^{2+} dalam pelarut air	7
II.1.5 Metode <i>ab initio</i> HF dan himpunan basis	9
II.1.6 Simulasi DM-QMCF	12
II.1.7 Analisis trajektori simulasi DM-QMCF	18
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	20
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	20
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 Peralatan	22
III.1.1 Perangkat keras	22
III.1.2 Perangkat lunak	22
III.2 Prosedur Penelitian	22
III.2.1 Validasi metode kimia komputasi	22
III.2.2 Protokol simulasi	22
III.2.3 Analisis trajektori simulasi DM-QMCF	23
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	25
IV.1 Validasi Metode Kimia Komputasi	25
IV.2 Analisis Struktur Ion Ca^{2+} dalam Amoniak Cair	28
IV.2.1 Analisis fungsi distribusi radial	28
IV.2.2 Analisis distribusi bilangan koordinasi	30
IV.2.3 Analisis fungsi distribusi angular	34
IV.3 Analisis Dinamika Ion Ca^{2+} dalam Amoniak Cair	36
IV.3.1 Analisis waktu tinggal rata-rata ligan dalam solvasi kulit pertama dan kedua	36
IV.3.2 Analisis vibrasi ulur atom pusat-ligan kulit solvasi pertama	42

BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN	44
	V.1 Kesimpulan	44
	V.2 Saran	44
DAFTAR PUSTAKA		45
LAMPIRAN		49