

## DAFTAR ISI

<b>TESIS</b>	<b>i</b>
<b>LEMBAR PENGESAHAN</b>	<b>ii</b>
<b>PERNYATAAN</b>	<b>iii</b>
<b>PRAKATA</b>	<b>iv</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	<b>vii</b>
<b>DAFTAR TABEL</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</b>	<b>4</b>
II.1 Sifat Kimia dan Fisika Logam Litium dan Amoniak Cair	4
II.2 Struktur Solvasi Li <sup>+</sup> dalam Berbagai Pelarut	4
II.2.1 Struktur Solvasi Li <sup>+</sup> dalam Pelarut Air	4
II.2.2 Struktur Solvasi Li <sup>+</sup> dalam Pelarut Air-Amoniak	6
II.2.3 Struktur Solvasi Li <sup>+</sup> dalam Amoniak Cair	6
II.3 Metode Ab Initio Hartree-Fock (HF)	10
II.4 Himpunan Basis	12
II.5 Simulasi Dinamika Molekular QMCF	13
II.5.1 Partisi gaya mekanika kuantum/mekanika molekular (MK/MM)	13
II.5.2 Kondisi batas berulang dan aturan bayangan terkecil	16
II.5.3 Medan reaksi	18
II.5.4 Algoritma integrasi prediktor-korektor	19
II.6 Analisis Trajektori Simulasi Dinamika Molekular	20
II.6.1 Analisis struktural solvasi ion logam	20
II.6.2 Analisis dinamika solvasi ion dalam larutan	21
<b>BAB III LANDASAN TEORI</b>	<b>23</b>
III.1 Landasan Teori	23
III.2 Perumusan Hipotesis	24
III.3 Rancangan Penelitian	25
<b>BAB IV METODE PENELITIAN</b>	<b>26</b>
IV.1 Waktu dan Tempat Penelitian	26
IV.2 Peralatan	26
IV.2.1 Perangkat keras	26
IV.2.2 Perangkat lunak	26
IV.3 Validasi Metode Kimia Komputasi	26

IV.4 Protokol Simulasi	27
IV.5 Analisis Trajektori Simulasi Dinamika Molekular QMCF	28
IV.5.1 Analisis struktur solvasi Li <sup>+</sup> dalam amoniak cair	28
IV.5.2 Analisis dinamika solvasi Li <sup>+</sup> dalam amoniak cair	28
<b>BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	<b>29</b>
V.1 Validasi Metode Kimia Komputasi	29
V.2 Analisis Struktur Solvasi Li <sup>+</sup> dalam Amoniak Cair	32
V.2.1 Analisis fungsi distribusi radial (RDF)	32
V.2.2 Analisis distribusi bilangan koordinasi (CND)	37
V.2.3 Analisis distribusi fungsi sudut angular (ADF)	39
V.3 Analisis Sifat Dinamika Solvasi Li <sup>+</sup> dalam Amoniak Cair	41
V.3.1 Analisis waktu tinggal rata-rata ligan NH <sub>3</sub> dalam kulit solvasi pertama dan kedua	41
V.3.2 Analisis vibrasi ulur atom pusat-ligan kulit solvasi pertama	46
<b>BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN</b>	<b>48</b>
VI.1 Kesimpulan	48
VI.2 Saran	48
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	<b>49</b>

## DAFTAR GAMBAR

Gambar II.1 Pemodelan STO oleh kombinasi linear 3 GTO (Jensen, 2007)	13
Gambar II.2 Partisi kotak simulasi MK/MM	14
Gambar II.3 Partisi kotak simulasi QMCF (Hofer dkk., 2008b))	16
Gambar II.4 Kondisi batas berulang (Leach, 2001)	17
Gambar II.5: Aturan bayangan terkecil (Leach, 2001)	18
Gambar V.1 Struktur $[\text{Li}(\text{NH}_3)_4]^+$ hasil optimasi HF/DZP	29
Gambar V.2 Kurva energi interaksi $\text{Li}^+\text{-NH}_3$	31
Gambar V.3 Fungsi distribusi radial dan integrasi untuk $\text{Li}^+\text{-N}$ (garis penuh) dan $\text{Li}^+\text{-H}$ (garis putus-putus)	33
Gambar V.4 Distribusi bilangan koordinasi kulit solvasi pertama dan kedua sistem $\text{Li}^+$ dalam amoniak cair	38
Gambar V.5 Perubahan bilangan koordinasi kulit solvasi pertama (bawah) dan kulit solvasi kedua (atas) selama waktu simulasi sistem $\text{Li}^+$ dalam amoniak cair	38
Gambar V.6 Distribusi sudut ikatan $\text{N-Li(I)-N}$ $[\text{Li}(\text{NH}_3)_4]^+$ di kulit solvasi pertama	40
Gambar V.7 Kulit solvasi pertama $\text{Li}^+$ dalam amoniak cair	40
Gambar V.8 $\text{Li}^+$ dalam amoniak cair. Warna biru adalah molekul $\text{NH}_3$ dalam kulit solvasi pertama. Warna oranye adalah molekul $\text{NH}_3$ dalam kulit solvasi kedua	41
Gambar V.9 Perubahan Jarak $\text{Li}^+\text{-NH}_3$ pada kulit solvasi pertama dan kedua	43
Gambar V.10 (a) Plot jarak $\text{Li}^+\text{-N}$ vs waktu simulasi (b) penataan tetrahedral kulit solvasi pertama (c) penataan trigonal bipiramida pada tA1	44
Gambar V.11 Perubahan dari RMSD geometri ideal tetrahedral pada kulit solvasi pertama. tA1 dan tA2 menandakan dua usaha pertukaran ligan yang teramati selama simulasi 12 ps	45
Gambar V.12 Struktur tetrahedral pada 9,8 ps	46
Gambar V.13 Spektra vibrasi atom pusat dengan ligan dari simulasi dinamika molekular QMCF. Puncak tunggal merupakan nilai yang diperoleh dari eksperimen (Gardiner, 1973)	47

## DAFTAR TABEL

Tabel V.1 Jarak $\text{Li}^+\text{-N}$ dalam kompleks $[\text{Li}(\text{NH}_3)_4]^+$ hasil optimasi geometri ab initio HF, MP2 dan eksperimen difraksi inti dan sinar-X	30
Tabel V.2 Energi BSSE dihitung menggunakan metode ab initio HF dan MP2	30
Tabel V.3 Nilai karakteristik RDF untuk $\text{Li}^+$ dalam amoniak cair yang diperoleh dari simulasi dinamika molekular QMCF	33
Tabel V.4 Sifat struktural kulit solvasi pertama $\text{Li}^+$ dalam amoniak cair	36
Tabel V.5 Waktu tinggal ligan rata-rata, $\tau$ , dalam satuan ps dan data dinamika lainnya untuk ion $\text{Li}^+$ dalam $\text{NH}_3$ yang dievaluasi dengan metode langsung pada $t^* = 0,0$ dan $0,5$ ps	42

## DAFTAR LAMPIRAN

Daftar publikasi yang telah dilakukan	56
Contoh file input simulasi dinamika molekular QMCF	56
file output simulasi dinamika molekular QMCF	57
Struktur kompleks $\text{Li}^+ \cdot n\text{NH}_3$ ( $n=1-4$ )	62
Koordinat atom $[\text{Li}(\text{NH}_3)_4]^+$ dan $[\text{Li}(\text{NH}_3)_5]^+$ dalam format XYZ	63
Koordinat molekul $\text{NH}_3$ (dalam satuan Bohr)	64