

DAFTAR ISI

PERNYATAAN	ii	
KATA PENGANTAR	iii	
DAFTAR ISI	v	
DAFTAR TABEL	viii	
DAFTAR GAMBAR	ix	
INTISARI	xi	
ABSTRACT	xii	
BAB I	PENDAHULUAN	1
	I.1 Latar Belakang	1
	I.2 Tujuan Penelitian	4
	I.3 Manfaat Penelitian	4
BAB II	TINJAUAN PUSTAKA	5
	II.1 Aktinium	5
	II.2 Air	8
	II.3 Solvasi	9
	II.4 Gaya Mekanika Klasik / <i>Molecular Mechanics (MM)</i>	11
	II.4.1 Gaya regangan (<i>Stretching forces</i>)	15
	II.4.2 Gaya sudut (<i>Angle forces</i>)	17
	II.4.3 Gaya inversi (<i>Inversion forces</i>)	19
	II.4.4 Gaya dihedral (<i>Dihedral forces</i>)	19
	II.4.5 Gaya non-ikatan (<i>Non-bonded forces</i>)	21
	Gaya elektrostatik	21
	Gaya van der Waals	28
	Gaya 2-body, 2-body terkoreksi 3-body, dan terkoreksi n-body	29
	Long-range corection	31
	II.5 Gaya Kuantum (<i>Quantum Forces</i>)	32
	II.5.1 Aproksimasi <i>Hartree-Fock (HF)</i>	38
	II.5.2 Himpunan basis (<i>Basis sets</i>)	40
	II.5.3 Kesalahan superposisi himpunan basis	41

BAB III	LANDASAN TEORI, HIPOTESIS, DAN RANCANGAN PENELITIAN	44
	III.1 Landasan Teori	44
	III.1.1 Simulasi Molecular Dynamics (<i>MD Simulations</i>)	45
	III.1.2 Kondisi batas berulang (<i>Periodic boundary condition</i>)	49
	III.1.3 Aturan bayangan terkecil (<i>Minimum image convention</i>)	50
	III.1.4 <i>Hybrid Quantum Mechanics /Molecular Mechanics</i> (<i>QM/MM</i>)	51
	III.1.5 Analisis Struktur, dan Dinamika Solvasi	52
	III.1.6 Efek relativistik (<i>Relativistic effect</i>)	55
	III.2 Dasar Pemikiran & Hipotesis	56
	Dasar pemikiran & hipotesis 1	56
	Dasar pemikiran & hipotesis 2	56
	Dasar pemikiran & hipotesis 3	56
	Dasar pemikiran & hipotesis 4	56
	III.3 Rancangan Penelitian	57
BAB IV	METODE PENELITIAN	59
	IV.1 Alat dan Bahan	59
	Perangkat keras	59
	Perangkat lunak	59
	Sistem yang digunakan	59
	IV.2 Prosedur Kerja	59
	Penentuan koordinat sistem $Ac^{3+} - OH_2$	59
	Penentuan himpunan basis	59
	Fitting energi	61
	Simulasi <i>QM/MM-MD</i>	61
	Protokol simulasi	61
	Analisis stuktur, dan dinamika sistem	62
	IV.3 Tempat, dan Periode Simulasi	62
BAB V	HASIL DAN PEMBAHASAN	63
	V.1 Pengaruh fungsi <i>non-Relativistik</i> dan <i>Relativistik</i> terhadap <i>Basis Sets</i>	63

V.2	Penentuan Fungsi Potensial <i>2-body</i> and <i>2-body</i> terkoreksi <i>3-body</i>	66
V.3	Pengaruh Gaya <i>QM</i> Terhadap Struktur Solvasi Dibandingkan Dengan Gaya <i>MM</i>	69
V.4	Pengaruh Potensial koreksi <i>3-body</i> Terhadap Fleksibilitas <i>Shell</i> Solvasi Dibandingkan Dengan Potensial <i>2-body</i>	71
V.4.1	<i>CND</i> (<i>Coordination Number Distribution</i>)	76
V.4.2	<i>ADF</i> (<i>Angular Distribution Function</i>)	78
V.4.3	<i>Tilt and Theta Calculation</i> (<i>TiltCalc</i> dan <i>ThetaCalc</i>)	80
V.4.4	Fungsi jarak interaksi ion-ligan	81
V.5	Pengaruh Kuat Medan Ac^{3+} Terhadap Pembentukan <i>shell</i> solvasi	82
BAB IV	KESIMPULAN DAN SARAN	84
VI.1	Kesimpulan	84
VI.2	Saran	84
	DAFTAR PUSTAKA	86