

DAFTAR ISI

PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR LAMPIRAN	ix
INTISARI	x
ABSTRACT	xi
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	4
II.1 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 Solvasi ion Sr^{2+} dalam air	4
II.1.2 Sifat kimia dan fisika logam stronsium dan amoniak cair	5
II.1.3 Simulasi dinamika molekuler QMCF	6
II.1.4 Analisis trajektori simulasi dinamika molekuler	17
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	19
II.2.1 Perumusan hipotesis I	19
II.2.2 Perumusan hipotesis II	19
II.2.3 Perumusan hipotesis III	19
II.2.4 Rancangan Penelitian	20
BAB III METODE PENELITIAN	21
III.1 Peralatan	21
III.1.1 Perangkat keras	21
III.1.2 Perangkat lunak	21
III.2 Validasi Metode Kimia Komputasi	21
III.3 Protokol Simulasi	21
III.4 Analisis Trajektori	22
III.4.1 Analisis struktur solvasi ion Sr^{2+} dalam amoniak cair	22
III.4.2 Analisis dinamika solvasi ion Sr^{2+} dalam amoniak cair	23
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	24
IV.1 Validasi Metode Kimia Komputasi	24
IV.2 Analisis Struktur Solvasi	26
IV.2.1 Analisis RDF	26
IV.2.2 Analisis CND	28
IV.2.3 Analisis ADF	31
IV.3 Analisis Sifat Dinamika Solvasi	32
IV.3.1 Analisis waktu tinggal rata-rata ligan NH_3 dalam kulit solvasi pertama dan kedua	32
IV.3.2 Analisis vibrasi ulur atom pusat-ligan kulit solvasi pertama	38

V.1	Kesimpulan	39
V.2	Saran	39
	DAFTAR PUSTAKA	40
	LAMPIRAN	44