

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iii
KATA PENGANTAR	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR	vii
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	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Sifat kimia dan fisika natrium dan amonia cair	5
II.1.2 Struktur solvasi ion natrium	5
II.1.3 Simulasi amonia cair	8
II.1.4 Metode <i>ab initio</i> Hartee-Fock	10
II.1.4 Himpunan basis	10
II.1.5 Fungsi potensial Lennard-Jones	12
II.1.6 Simulasi dinamika molekul QMCF	12
a) Partisi gaya mekanika kuantum/mekanika molekul (MK/MM)	12
b) Kondisi batas berulang (<i>periodic boundary conditions</i>)	15
c) Aturan bayangan terkecil (<i>minimum image convention</i>)	15
d) Medan reaksi	16
e) Algoritma integrasi prediktor-korektor	17
II.1.7 Analisis Trajektori	18
a) Analisis data struktur solvasi	18
b) Analisis data dinamika solvasi	19
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	20
II.2.1 Dasar pemikiran I	20
II.2.2 Dasar pemikiran II	20
II.2.3 Dasar pemikiran III	20
II.2.4 Rancangan penelitian	21
BAB III METODE PENELITIAN	22
III.1 Pelaksanaan Penelitian	22
III.2 Peralatan Penelitian	22
III.2.1 Perangkat keras	22

III.2.2 Perangkat lunak	22
III.3 Prosedur Kerja	22
III.3.1 Penentuan metode komputasi	22
III.3.2 Protokol simulasi	23
a) Kotak simulasi	23
b) Metode simulasi DM QMCF	23
III.3.3 Analisis trajektori simulasi DM QMCF	24
a) Analisis data struktur solvasi	24
b) Analisis data dinamika molekul amonia	24
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	25
IV.1 Penentuan Metode Komputasi	25
IV.2 Analisis Struktur Solvasi Ion Natrium dalam Amonia Cair	29
IV.2.1 Analisis fungsi distribusi radial (<i>Radial Distribution Function, RDF</i>)	29
IV.2.2 Analisis distribusi bilangan solvasi (<i>Solvation Number Distribution, SND</i>)	31
IV.2.3 Analisis distribusi sudut anguler (<i>Angular Distribution Function, ADF</i>)	34
IV.3 Analisis Dinamika Solvasi Ion Natrium dalam Amonia Cair	36
IV.3.1 Analisis waktu tinggal rata-rata (<i>Mean Residence Time, MRT</i>)	36
IV.3.2 Analisis vibrasi ulur	39
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	41
V.1 Kesimpulan	41
V.2 Saran	41
DAFTAR PUSTAKA	42
LAMPIRAN	46