

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL .....	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN.....	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN .....	iv
PRAKATA .....	v
DAFTAR ISI .....	vi
DAFTAR GAMBAR .....	viii
DAFTAR TABEL .....	ix
DAFTAR SINGKATAN .....	x
INTISARI .....	xi
<i>ABSTRACT</i> .....	xii
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 Logam Kobalt .....	4
II.2 Amoniak sebagai Pelarut .....	5
II.3 Solvasi Ion Kobalt(III) dalam Pelarut Amoniak.....	5
II.4 Metode Ab Initio HF dan Himpunan Basis .....	7
II.4.1 Metode ab initio Hartree-Fock .....	7
II.4.2 Himpunan basis .....	9
II.5 Simulasi Dinamika Molekular QMCF.....	10
II.5.1 Partisi gaya MK/MM .....	10
II.5.2 Kondisi batas berulang dan aturan bayangan terkecil.....	12
II.5.3 Metode RF ( <i>Reaction Field</i> ).....	13
II.6 Analisis Trajektori Simulasi Dinamika Molekular.....	15
II.7 Perumusan Hipotesis.....	17
II.8 Rancangan Penelitian.....	18
BAB III METODE PENELITIAN .....	19
III.1 Peralatan.....	19
III.1.1 Perangkat keras .....	19
III.1.2 Perangkat lunak.....	19
III.2 Prosedur Penelitian .....	19
III.2.1 Validasi metode kimia komputasi.....	19
III.2.2 Protokol simulasi .....	19
III.2.3 Analisis trajektori simulasi DM-QMCF .....	21
BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN .....	22
IV.1 Validasi Metode Kimia Komputasi .....	22
IV.2 Analisis Energi.....	22
IV.3 Analisis Struktur dan Dinamika Kulit Solvasi Pertama .....	24
IV.3.1 Fungsi distribusi jarak (RDF).....	24
IV.3.2 Analisis distribusi bilangan koordinasi (CND) .....	26

IV.3.3 Analisis fungsi distribusi sudut (ADF).....	27
IV.3.4 Analisis waktu tinggal rata – rata ligan NH <sub>3</sub> (MRT).....	29
IV.3.5 Analisis vibrasi .....	30
IV.4 Analisis Struktur dan Dinamika Kulit Solvasi Kedua .....	31
IV.4.1 Analisis fungsi distribusi jarak (RDF).....	31
IV.4.2 Analisis distribusi bilangan koordinasi (CND) .....	31
IV.4.3 Analisis distribusi sudut (ADF).....	33
IV.4.4 Analisis waktu tinggal rata-rata ligan NH <sub>3</sub> (MRT).....	34
IV.4.5 Analisis vibrasi .....	35
IV.5 Kesimpulan.....	36
IV.6 Saran .....	36
DAFTAR PUSTAKA .....	37
LAMPIRAN .....	42