

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN DEPAN</b>	i
<b>HALAMAN JUDUL</b>	ii
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b>	iii
<b>HALAMAN PERNYATAAN</b>	iv
<b>KATA PENGANTAR</b>	v
<b>DAFTAR ISI</b>	vii
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	ix
<b>DAFTAR TABEL</b>	x
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b>	xi
<b>INTISARI</b>	xii
<b>ABSTRACT</b>	xiii
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	1
1.1 Latar Belakang Penelitian	1
1.2. Tujuan Penelitian	3
1.3 Manfaat Penelitian	4
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA, PERUMUSAN HIPOTESIS, DAN RANCANGAN PENELITIAN</b>	5
2.1. Tinjauan Pustaka	5
2.1.1 Sifat kimia dan fisika berilium	5
2.1.2. Sifat kimia dan fisika ammonia	6
2.1.3 Kajian solvasi berilium dalam berbagai pelarut	7
2.1.4 Kajian solvasi ion logam dalam pelarut ammonia	9
2.1.5 Metode <i>ab initio</i> Hartree-Fock (HF)	9
2.1.6 Partisi gaya mekanika kuantum/mekanika molekular (MK/MM) simulasi dinamika molekular QMCF	11
2.1.7 Himpunan basis	14
2.1.8. Kondisi batas berulang dan aturan bayangan terkecil	15
2.2. Perumusan Hipotesis	17
2.3 Rancangan Penelitian	18
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	19
3.1 Waktu dan Tempat Penelitian	19
3.2 Peralatan	19
3.2.1 Perangkat keras	19

3.2.2 Perangkat lunak	19
3.3 Validasi Metode Kimia Komputasi	20
3.4 Protokol Simulasi	20
3.5 Analisis Trajektori Simulasi Dinamika Molekular QMCF	21
3.5.1 Analisis struktur solvasi $\text{Be}^{2+}$ dalam ammonia cair	21
3.5.2 Analisis dinamika solvasi $\text{Be}^{2+}$ dalam ammonia cair	21
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	22
4.I. Validasi Metode Kimia Komputasi	22
4.2 Analisis Struktur Solvasi $\text{Be}^{2+}$ dalam Ammonia Cair	26
4.2.1 Analisis fungsi distribusi jarak / <i>radial distribution function</i> (RDF)	26
4.2.2 Analisis distribusi bilangan koordinasi / <i>coordination number distribution</i> (CND)	29
4.2.3 Analisis fungsi distribusi sudut / <i>angular distribution function</i> (ADF)	31
4.3 Analisis Sifat Dinamika Solvasi Ion $\text{Be}^{2+}$ dalam Ammonia Cair	33
4.3.1 Analisis waktu tinggal rata – rata ligan $\text{NH}_3$ dalam kulit solvasi pertama dan kedua	34
4.3.2 Analisis vibrasi ulur atom pusat – ligan kulit solvasi pertama	36
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b>	38
5.1 Kesimpulan	38
5.2 Saran	38
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	39
<b>LAMPIRAN</b>	44
Perhitungan Konstanta Gaya	44
Himpunan Basis LANL2DZ untuk $\text{Be}^{2+}$ yang telah Teroptimasi	45
Data plotting Kurva Interaksi Jarak dan Energi $\text{Be}^{2+}-\text{N}$	46

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	Partisi kotak simulasi MK/MM	12
Gambar 2.2	Himpunan basis STO oleh kombinasi linear 3 GTO	15
Gambar 2.3	Kondisi batas berulang	16
Gambar 4.1	Struktur $[\text{Be}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ hasil optimasi dengan metode HF	23
Gambar 4.2	Kurva interaksi energi dan jarak $\text{Be}^{2+}-\text{NH}_3$ dengan metode HF dan MP2	25
Gambar 4.3	Kurva fungsi distribusi jarak dan integrasinya untuk $\text{Be}^{2+}-\text{N}$ dan $\text{Be}^{2+}-\text{H}$	27
Gambar 4.4	Histogram distribusi bilangan koordinasi pada kulit solvasi pertama dan kulit solvasi kedua sistem ion $\text{Be}^{2+}$ dalam ammonia cair	30
Gambar 4.4	Kurva distribusi sudut ikatan $\text{N}-\text{Be}^{2+}-\text{N}$ pada senyawa $[\text{Be}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ pada kulit solvasi pertama	32
Gambar 4.5	Visualisasi solvasi $\text{Be}^{2+}$ dalam ammonia cair pada kulit solvasi pertama	33
Gambar 4.6	Visualisasi ion $\text{Be}^{2+}$ dalam $\text{NH}_3$ cair. Warna biru adalah molekul $\text{NH}_3$ pada kulit solvasi pertama dan warna jingga adalah molekul $\text{NH}_3$ pada kulit solvasi kedua	33
Gambar 4.7	Perubahan jarak $\text{Be}^{2+}-\text{NH}_3$ pada kulit solvasi pertama dan kedua	36
Gambar 4.8	Spektra vibrasi atom pusat dengan ligan dari simulasi dinamika molekular QMCF	37

## DAFTAR TABEL

Tabel 2.1	Tabel rasio muatan/jari – jari beberapa logam	6
Tabel 4.1	Data jarak $\text{Be}^{2+}$ -N dalam struktur solvasi $[\text{Be}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ hasil optimasi geometri <i>ab initio</i> HF dan MP2	23
Tabel 4.2	Data energi BSSE yang dihitung menggunakan metode <i>ab initio</i> HF dan MP2	24
Tabel 4.3	Daftar Nilai karakteristik kurva RDF untuk $\text{Be}^{2+}$ dalam ammonia cair yang diperoleh dari hasil simulasi dinamika molekular QMCF	27
Tabel 4.4	Waktu tinggal rata – rata, $\tau$ , dalam satuan ps dan data dinamika yang berkaitan untuk ion $\text{Be}^{2+}$ dalam $\text{NH}_3$ yang dievaluasi dengan metode langsung pada $t^* = 0,0$ dan $0,5$ ps	34

## DAFTAR LAMPIRAN

Perhitungan Konstanta Gaya	43
Himpunan Basis LANL2DZ untuk $\text{Be}^{2+}$ yang telah Teroptimasi	44
Data plotting Kurva Interaksi Jarak dan Energi $\text{Be}^{2+}-\text{N}$	45