

DISERTASI

KAJIAN TEORITIS SIFAT STRUKTUR DAN DINAMIKA ION Sc^+ *SINGLET* (1D) DAN *TRIPLET* (3D) DALAM AIR, AMONIAK CAIR, DAN CAMPURAN AMONIAK-AIR MENGGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER *AB INITIO* MEKANIKA KUANTUM/MEKANIKA MOLEKULER

THEORETICAL STUDY OF STRUCTURAL AND DYNAMICAL PROPERTIES OF SINGLET (1D) Sc^+ AND TRIPLET (3D) IONS IN WATER, LIQUID AMMONIA AND AMMONIA-WATER MIXTURE USING MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF *AB INITIO* QUANTUM MECHANICS/MOLECULAR MECHANICS



Crys Fajar Partana
08/276529/SPA/00205

PROGRAM STUDI S3 KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS GADJAH MADA
2015