

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL SAMPUL	i
HALAMAN JUDUL DUA BAHASA	ii
HALAMAN PENGESAHAN	iii
HALAMAN PERNYATAAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR GAMBAR	x
INTISARI	xiii
ABSTRACT	xiv
DAFTAR ISTILAH DAN SINGKATAN	xv
I. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang dan Permasalahan	1
1.2 Tujuan dan Manfaat Penelitian	6
1.2.1 Tujuan penelitian	6
1.2.2 Manfaat penelitian	7
1.3 Keaslian dan Kebaruan	7
II. TINJAUAN PUSTAKA	10
2.1 Sifat Struktur dan Dinamika Ion dalam Larutan	10
2.2 Simulasi Dinamika Molekuler	13
2.3 Algoritma dalam Simulasi Dinamika Molekuler	16
2.3.1 Algoritma Verlet	16
2.3.2 Algoritma Leap-Frog	17
2.3.3 Algoritma kecepatan Verlet	17
2.3.4 Algoritma Beeman	17
2.3.5 Algoritma Lavenberg-Marquardt	18
2.4 Periodic Boundary Conditions (PBC)	18
2.5 Minimum Image Convention (MIC)	19
2.6 Simulasi Dinamika Molekuler Mekanika Kuantum/Mekanika Molekuler (DM MK/MM)	20
2.7 Mekanika Statistik	22
2.8 Sifat-sifat Skandium	24
2.9 Analisis Sifat Struktur	26
2.10 Analisis Sifat Dinamika	28
III. LANDASAN TEORI, HIPOTESIS DAN RANCANGAN PENELITIAN	31
3.1 Landasan Teori	31
3.2 Hipotesis	34
3.2.1 Dasar pemikiran I - Perbedaan solvasi ion Sc ⁺ singlet (¹ D) dan triplet (³ D) dalam air dan amoniak cair	34
3.2.2 Dasar pemikiran II—Perbedaan waktu tinggal ligan dalam	

	solvasi ion Sc ⁺ singlet (¹ D) dan triplet (³ D) dalam air atau amoniak cair	35
3.2.3	Dasar pemikiran III - Sistem solvasi ion Sc ⁺ singlet (¹ D) dan triplet (³ D) dalam campuran amoniak-air	35
3.3	Rancangan Penelitian	36
3.3.1	Rancangan penelitian untuk membuktikan hipotesis perbedaan solvasi ion Sc ⁺ singlet (¹ D) dan triplet (³ D) dalam air dan amoniak cair	37
3.3.2	Rancangan penelitian untuk membuktikan hipotesis perbedaan waktu tinggal ligan dalam solvasi ion Sc ⁺ singlet (¹ D) dan triplet (³ D) dalam air dan amoniak cair	37
3.3.3	Rancangan penelitian untuk membuktikan hipotesis perbedaan solvasi ion Sc ⁺ singlet (¹ D) dan triplet (³ D) dalam campuran amoniak-air	37
IV.	METODE PENELITIAN	39
4.1	Peralatan dan Materi Penelitian	39
4.1.1	Peralatan	39
4.1.2	Materi Penelitian	40
4.2	Prosedur Kerja dan Pengumpulan Data	40
4.2.1	Penentuan koordinat ion Sc ⁺ (¹ D, ³ D)-H ₂ O dan Sc ⁺ (¹ D, ³ D)-NH ₃ dalam koordinat kartesian	40
4.2.2	Pemilihan himpunan basis terbaik	41
4.2.3	Penyusunan potensial pasangan dan potensial 3-badan	42
4.2.4	Simulasi DM MK/MM	45
V.	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	47
5.1	Penentuan Himpunan Basis Terbaik	47
5.2	Penentuan Persamaan Potensial 2-badan dan 3-badan	51
5.2.1	Penentuan persamaan potensial 2-badan untuk Sc ⁺ (¹ D, ³ D)-H ₂ O dan Sc ⁺ (¹ D, ³ D)-NH ₃	51
5.2.2	Penentuan persamaan 3-badan untuk H ₂ O-Sc ⁺ (¹ D, ³ D)-H ₂ O dan NH ₃ -Sc ⁺ (¹ D, ³ D)-NH ₃	53
5.3	Perbandingan Simulasi Dinamika Molekuler ion Sc ⁺ singlet (¹ D) dan triplet (³ D) dalam Air	56
5.3.1	Struktur solvasi ion Sc ⁺ singlet (¹ D) dan triplet (³ D) dalam air	57
5.3.2	Dinamika solvasi ion Sc ⁺ singlet (¹ D) dan triplet (³ D) dalam air	74
5.4	Perbandingan Struktur dan Dinamika Simulasi Dinamika Molekular Solvasi Ion Sc ⁺ Singlet (¹ D) dan Triplet (³ D) dalam Amoniak Cair	79
5.4.1	Struktur solvasi ion Sc ⁺ singlet (¹ D) dan triplet (³ D) dalam amoniak cair	80
5.4.2	Perbandingan Dinamika solvasi ion Sc ⁺ singlet (¹ D) dan triplet (³ D) dalam amoniak cair	96

5.5	Perbandingan Struktur Solvasi Ion Sc ⁺ Singlet (¹ D) dan Triplet (³ D) dalam Campuran Amoniak-air	102
5.5.1	Struktur solvasi ion Sc ⁺ singlet (¹ D) dan triplet (³ D) dalam campuran amoniak-air	102
5.5.2	Perbandingan dinamika solvasi ion Sc ⁺ singlet (¹ D) dan triplet (³ D) dalam campuran amoniak-air	127
5.6	Perbandingan Reaktivitas Ion Sc ⁺ Singlet (¹ D) dan Triplet (³ D) dalam Air, Amoniak Cair, dan Campuran Amoniak-air	135
VI.	KESIMPULAN DAN SARAN	141
6.1	Kesimpulan	141
6.2	Saran	142
	DAFTAR PUSTAKA	143
	LAMPIRAN	147
Lampiran 1	Himpunan basis yang digunakan dalam penelitian	148
Lampiran 2	Contoh Output fitting 2-badan untuk sistem ion Sc ⁺ singlet (¹ D) dengan air (H ₂ O)	152
Lampiran 3	Langkah Penyusunan Potensial Badan Tiga untuk sistem NH ₃ -Sc ⁺ (¹ D, ³ D)-NH ₃	155
Lampiran 4	Contoh Output Fitting 3-badan H ₂ O-Sc ⁺ (¹ D)-H ₂ O dengan basis set Lanl2dz ecp untuk atom Sc dan DZP dunning untuk atom H dan O	159
Lampiran 5	Contoh Input File Perhitungan Simulasi Ion Sc ⁺ singlet (¹ D) dalam H ₂ O dengan Program Simulasi QM/MM MK	162
Lampiran 6	Contoh file trajectory hasil simulasi DM MK/MM ion Sc ⁺ singlet (¹ D) dalam air	163
Lampiran 7	Biodata Singkat	