

DAFTAR ISI

PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR LAMPIRAN	ix
DAFTAR SINGKATAN	x
INTISARI	xi
ABSTRAK	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 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 Sifat kimia dan fisika tembaga dan larutan amoniak	4
II.1.2 Solvasi ion Cu^+ dalam pelarut air dan amoniak	5
II.1.3 Preferensial logam golongan transisi dalam campuran amoniak-air	7
II.1.4 Konsep dan perkembangan simulasi dinamika molekuler	8
II.1.5 Simulasi dinamika molekuler QMCF	14
II.1.6 Analisis trajektori simulasi dinamika molekuler	20
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	22
II.2.1 Perumusan hipotesis I	22
II.2.2 Perumusan hipotesis II	22
II.2.3 Perumusan hipotesis III	23
II.2.4 Rancangan Penelitian	23
BAB III METODE PENELITIAN	24
III.1 Peralatan	24
III.1.1 Perangkat keras	24
III.1.2 Perangkat lunak	24
III.2 Prosedur Penelitian	24
III.2.1 Validasi metode	24
III.2.2 Protokol simulasi	25
III.2.3 Analisis trajektori simulasi DM-QMCF	25
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	27
IV.1 Validasi Metode	27
IV.2 Analisis Solvasi Preferensial	30
IV.2.1 Analisis fungsi distribusi radial	30
IV.2.2 Analisis distribusi bilangan koordinasi	32
IV.2.3 Analisis fungsi distribusi angular	35
IV.3 Analisis Sifat Dinamika Solvasi	37

	IV.3.1 Analisis waktu tinggal rata-rata (<i>Mean Residence Time</i>)	37
	IV.3.2 Analisis vibrasi ulur atom pusat-ligan (Cu-N) di kulit solvasi pertama	40
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN	42
	V.1 Kesimpulan	42
	V.1 Saran	42
	DAFTAR PUSTAKA	43
	LAMPIRAN	46

DAFTAR GAMBAR

Gambar II.1	Kondisi batas berulang (Satoh, 20110)	12
Gambar II.2	Skema kotak simulasi DM-QMCF (Hofer dkk., 2010)	15
Gambar II.3	Perbandingan himpunan basis dengan berbagai fungsi	20
Gambar IV.1	Kurva energi interaksi Cu^+ -Ligan	29
Gambar IV.2	Grafik RDF dan Integrasi Cu-Ligan	31
Gambar IV.3	Distribusi bilangan koordinasi pada kulit solvasi pertama	33
Gambar IV.4	Distribusi bilangan koordinasi pada kulit solvasi kedua	33
Gambar IV.5.	Perubahan bilangan koordinasi pada kulit solvasi pertama	34
Gambar IV.6	Perubahan bilangan koordinasi pada kulit solvasi kedua	35
Gambar IV.7	Distribusi sudut ikatan N-Cu-CN pada kulit solvasi pertama	35
Gambar IV.8	Sistem ion Cu^+ dalam larutan amoniak 18,6%	36
Gambar IV.9	Waktu tinggal rata-rata ligan (MRT) kulit solvasi kedua	38
Gambar IV.10	Perubahan jarak Cu^+ - NH_3 pada kulit solvasi pertama dan kedua	38
Gambar IV.11	Perubahan jarak Cu^+ - H_2O pada kulit solvasi pertama dan kedua	39
Gambar IV.12	RMSD geometri tetrahedral pada kulit solvasi pertama	40
Gambar IV.13	Vibrasi ulur yang dibentuk oleh Cu- NH_3 pada kulit solvasi pertama	40

DAFTAR TABEL

Tabel IV.1 Perbandingan jarak Cu^+ -ligan hasil perhitungan komputasi dan eksperimen	27
Tabel IV.2 Energi BSSE (kkal/mol) ion Cu-ligan	28
Tabel IV.3 Energi interaksi dan jarak ion-ligan dihitung dengan metode MP2	29
Tabel IV.3 Nilai karakteristik RDF kulit solvasi pertama	31

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Perhitungan densitas dan molaritas sistem molekul dalam kotak simulasi	48
Lampiran 2. Contoh <i>input file</i> perhitungan simulasi DM-QMCF ion Cu^+ dalam larutan amoniak 18,6%	51
Lampiran 3. <i>Input file</i> Analisis fungsi distribusi radial (RDF) simulasi DM-QMCF ion Cu^+ dalam larutan amoniak 18,6%	53
Lampiran 4. <i>Input file</i> Analisis fungsi distribusi angular (ADF) simulasi DM-QMCF ion Cu^+ dalam larutan amoniak 18,6%	55
Lampiran 5. <i>Input file</i> Analisis distribusi bilangan koordinasi (CND) simulasi DM-QMCF ion Cu^+ dalam larutan amoniak 18,6%	57
Lampiran 6. <i>Input file</i> Analisis vibrasi ulur simulasi DM-QMCF dalam larutan amoniak 18,6%	59

DAFTAR SINGKATAN

Singkatan	Kepanjangan
ADF	<i>Angular distribution function</i>
B3LYP	Becke 3 Lee Yang Par
BJH-CF2	Bopp Jansco Heinzinger-Central Force
BSSE	<i>Basis set superposition error</i>
CCSD	<i>Coupled cluster single double</i>
CND	<i>Coordination number distribution</i>
DFT	<i>Density function theory</i>
DM-QMCF	Dinamika molekuler-quantum mechanical charge field
DZP	<i>Double zeta polarization</i>
EXAFS	<i>Extended x-ray absorption fine structure</i>
GTO	<i>Gaussian type orbital</i>
HF	Hartree Fock
ICR	<i>Ion cyclotron resonance</i>
LANL2DZ-ECP	<i>Los Alamos National Laboratory 2 Double-Z –Effective Core Potential</i>
MK	Mekanika kuantum
MK/MM	Mekanika kuantum/ mekanika molekuler
MM	Mekanika molekuler
MP2	Moller plesset 2
MRT	<i>Mean residence time</i>
ND	<i>Neutron diffraction</i>
RDF	<i>Radial distribution function</i>
RF	<i>Reaction field</i>
RMSD	<i>Root mean square deviation</i>
STO	<i>Slater type orbital</i>
VACFs	<i>Velocity autocorrelation function</i>
XRD	<i>X-ray diffraction</i>