

DAFTAR ISI

HALAMAN SAMPUL	i
HALAMAN JUDUL	ii
HALAMAN PENGESAHAN	iii
PERNYATAAN	iv
HALAMAN PERSEMBAHAN	v
PRAKATA	vi
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
DAFTAR ISTILAH	xi
INTISARI	xii
ABSTRACT	xiii
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 Zirkonium dioksida (ZrO ₂)	4
II.1.2 Termostat Berendsen	8
II.1.3 Simulasi dinamika molekular	9
II.1.4 <i>Self Consistent Charge Density Functional Tight-Binding</i> (SCC-DFTB)	11
II.2 Perumusan Hipotesis	12
II.2.1 Perumusan hipotesis I	12
II.2.2 Perumusan hipotesis II	13
II.2.3 Rancangan penelitian	13
BAB III METODE PENELITIAN	14
III.1 Materi Penelitian	14
III.2 Peralatan	14
III.3 Prosedur	14
III.3.1 Pemodelan struktur t-ZrO ₂ dan t-ZrO ₂ (101)	14
III.3.2 Pemodelan struktur t-ZrO ₂ (101) dan H ₂ O-H ₂ SO ₄	14
III.3.3 Simulasi dinamika molekular t-ZrO ₂ (101) dan H ₂ O-H ₂ SO ₄	15
III.3.4 Analisis data	15
BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	17
IV.1 Pemodelan Struktur t-ZrO ₂ (101)	17
IV.2 Pemodelan Simulasi Dinamika Molekular Struktur t-ZrO ₂ (101)	18
IV.3 Pemodelan Struktur t-ZrO ₂ (101) dan H ₂ O-H ₂ SO ₄	19
IV.4 Interaksi air (H ₂ O) pada permukaan t-ZrO ₂ (101)	21
IV.4.1 Analisis jumlah ikatan Zr (permukaan t-ZrO ₂) dengan Ow (H ₂ O)	24

IV.4.2 Analisis jumlah ikatan Oz (permukaan t-ZrO ₂) dengan H ₂ O	26
IV.5 Interaksi sulfat pada permukaan t-ZrO ₂ (101)	30
IV.5.1 Analisis jumlah ikatan Zr (permukaan t-ZrO ₂) dengan Os (H ₂ SO ₄)	31
IV.5.2 Analisis jumlah ikatan Oz (permukaan t-ZrO ₂) dengan H ₂ SO ₄	32
IV.6 Analisis RDF	33
IV.7 Analisis Vibrasi Molekul	37
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	38
V.1 Kesimpulan	38
V.2 Saran	38
DAFTAR PUSTAKA	39
LAMPIRAN	45