

DINAMIKA HIDRASI CERIUM (III) DALAM LARUTAN BERDASARKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL

Title	DINAMIKA HIDRASI CERIUM (III) DALAM LARUTAN BERDASARKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL
Author Order	of
Accreditation	
Abstract	<p>Penelitian tentang sifat dinamika hidrasi ion Ce³⁺ berdasarkan simulasi dinamika molekul telah dilakukan. Metode simulasi yang digunakan adalah simulasi dinamika molekul ab initio Quantum Mechanical Charge Field (QMCF). Metode ini membagi kotak simulasi menjadi 2 bagian. Bagian pertama yang meliputi lapisan hidrasi pertama dan kedua, dihitung dengan metode mekanika kuantum ab initio pada tingkatan teori Hartree-Fock (HF). Himpunan basis yang digunakan pada perhitungan mekanika kuantum untuk ion Ce³⁺ dan molekul air adalah SBKJC VDZ ECP dan DZP Dunning secara berurutan. Bagian kedua, di luar bagian pertama, dihitung dengan metode perhitungan mekanika klasik. Hasil penelitian menunjukkan bahwa ion Ce³⁺ memiliki lapisan hidrasi yang fleksibel pada lapisan hidrasi pertama dan kedua.</p>
Publisher Name	Prosiding
Publish Date	2012-10-30
Publish Year	2012
Doi	
Citation	
Source	Prosiding
Source Issue	Vol 3, No 1 (2012)
Source Page	
Url	http://journal.lppm.unsoed.ac.id/ojs/index.php/Prosiding/article/view/269
Author	Dr PONCO ISWANTO, M.Si