

Qurrachman, T., 2004. Simulasi *Monte Carlo* (MC) untuk Penentuan Struktur Solvasi Ion Ni^{2+} dalam Amoniak Cair Melibatkan Potensial Badan Dua. Skripsi dibawah bimbingan Drs. Faidur Rochman, MS. dan Drs. Imam Siswanto, M.Si., Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Airlangga, Surabaya

ABSTRAK

Simulasi *Monte Carlo* telah dilakukan untuk menentukan struktur solvasi ion Ni^{2+} di dalam sistem amoniak cair menggunakan potensial badan dua. Simulasi dijalankan di bawah kondisi NVT (293,15 K) dengan sistem 1 ion Ni^{2+} dalam 215 molekul amoniak. Hasil penelitian menunjukkan bahwa molekul amoniak yang mengelilingi ion Ni^{2+} pada kulit solvasi pertama sebanyak 9 dengan jarak Ni-N 2,460 Å dan pada kulit solvasi kedua sebanyak 23. Energi interaksi Ni^{2+} - NH_3 sebesar -205,016 kJ/mol. Sudut N- Ni^{2+} -N pada kulit solvasi pertama ion Ni^{2+} terdiri dari dua macam yaitu 57° dan 108° , yang bersesuaian dengan bentuk *tricapped trigonal prism*.

Kata Kunci : Simulasi MC, ion Ni^{2+} , Ni^{2+} - NH_3 , *ab Initio*, teori UHF, Metropolis