


| | | |
|---------------|--|---|
| No | 1 |  |
| Nama | HARNOWO | |
| No Mhs | 95/102065/PA/6252 | |
| Pembimbing I | Dr. Karna Wijaya, M.Eng | |
| Pembimbing II | Drs. Iqmal Tahir, M.Si. | |
| Skripsi | STUDI MEKANISME MIGRASI PROTON GANDA PADA IKATAN HIDROGEN DENGAN METODE <i>AB INITIO</i> | |
| Abstrak | <p>Telah dilakukan penelitian tentang mekanisme asam asetat dengan migrasi proton ganda pada asosiasi air dan amoniak secara teoretis.</p> <p>Penelitian meliputi penentuan struktur awal (reaktan), struktur keadaan transisi, dan struktur akhir (produk). Untuk keperluan penentuan tersebut dilakukan langkah-langkah penelitian sebagai berikut : pembuatan model reaktan, keadaan transisi dan produk. Tahap berikutnya adalah optimisasi geometri struktur dengan metode mekanika molekuler. Struktur teroptimisasi selanjutnya ditentukan frekuensi dan energi total tak terkoreksinya dengan metode <i>ab initio</i> dengan basis set 6-31G** menggunakan program Gaussian 94W.</p> <p>Hasil penelitian menunjukkan bahwa struktur transisi hipotetik sesuai dengan struktur yang diharapkan.</p> | |