

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PERSETUJUAN	ii
SURAT PERNYATAAN	iii
PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR TABEL	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xiii
INTISARI	xiv
ABSTRACT	xv
BAB I PENDAHULUAN.....	1
I.1 Latar Belakang.....	2
I.2 Perumusan Masalah.....	4
I.3 Kebaruan Penelitian.....	5
I.4 Tujuan Penelitian.....	9
I.5 Manfaat Penelitian.....	9
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	10
II.1 Tinjauan Pustaka	10
II.1.1 Kalkon, pirazolina dan metode sintesis.....	10
II.1.2 Kemosensor.....	15
II.1.3 Metode kimia komputasi untuk mendukung penelitian kemosensor.....	25
II.2 Perumusan Hipotesis	29
II.2.1 Hipotesis 1.....	29
II.2.2 Hipotesis 2.....	32
II.2.3 Hipotesis 3.....	34
II.2.4 Rancangan Penelitian	36
BAB III METODE PENELITIAN	38
III.1 Bahan dan Alat	38
III.1.1 Bahan.....	38
III.1.2 Alat.....	38
III.2 Prosedur Penelitian.....	38
III.2.1 Benzilasi vanilin.....	38
III.2.2 Sintesis senyawa intermediat kalkon	39
III.2.3 Sintesis pirazolina	39
III.2.4 <i>Screening</i> kation menggunakan spektrofotometer UV– Vis dan fluorometer.....	40
III.2.5 Penentuan <i>job's plot</i> , <i>limit of detection</i> (LOD), <i>limit of</i> <i>quantification</i> (LOQ), dan <i>binding constant</i>	40
III.2.6 Uji selektivitas dan interferensi dari kemosensor	41
III.2.7 Penentuan <i>quantum yield</i>	41
III.2.8 Prediksi mekanisme pengikatan kation dengan DFT	42

III.2.9 Prediksi mekanisme pengikatan kation dengan analisis FTIR dan $^1\text{H-NMR}$	42
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	44
IV.1 Sintesis eter vanilin 1 dan 4	44
IV.2 Sintesis kalkon 2 dan 5	51
IV.3 Sintesis pirazolina.....	58
IV.3.1 Sintesis pirazolina dari kalkon dengan fenilhidrazin (pirazolina 3A dan 6A).....	60
IV.3.2 Sintesis pirazolina dari kalkon dengan 2-hidrazinil-piridin 3B dan 6B	60
IV.3.3 Sintesis pirazolina dari kalkon dengan 2-hidrazino-benzotiazol (pirazolina 3C dan 6C).	73
IV.4 Uji aktivitas kalkon dan pirazolina sebagai kemosensor.....	80
IV.4.1 Skrining kation senyawa kalkon 2 dan 5	80
IV.4.2 Skrining kation senyawa pirazolina 3A-3C dan 6A-6C ..	73
IV.4.3 Jobs plot, <i>binding constant</i> (<i>K</i>), <i>limit of detection</i> (<i>LOD</i>), dan <i>limit of quantification</i> (<i>LOQ</i>) senyawa pirazolina 3A-3C dan 6A-6C	88
IV.4.4 Penentuan nilai <i>quantum yield</i>	92
IV.4.5 Uji interferensi senyawa pirazolina sebagai kemosensor..	95
IV.5 Prediksi mekanisme pengikatan ion logam oleh kalkon dan pirazolin dengan FTIR, $^1\text{H-NMR}$ dan metode <i>Density Functional Theory</i> (<i>DFT</i>)	100
IV.5.1 Analisis FTIR dengan dan tanpa ion logam Hg(II) senyawa pirazolina 3A dan 6A	102
IV.5.2 Analisis FTIR dengan dan tanpa ion logam Hg(II) senyawa pirazolina 3B dan 6B	101
IV.5.3 Analisis FTIR dengan dan tanpa ion logam Hg(II) senyawa pirazolina 3C dan 6C	103
IV.5.4 Analisis $^1\text{H-NMR}$ dengan dan tanpa ion logam Hg(II) senyawa pirazolina 3A dan 6A	105
IV.5.5 Analisis $^1\text{H-NMR}$ dengan dan tanpa ion logam Hg(II) senyawa pirazolina 3B dan 6B	107
IV.5.6 Analisis $^1\text{H-NMR}$ dengan dan tanpa ion logam senyawa pirazolina 3C dan 6C	109
IV.5.7 Analisis DFT dengan dan tanpa ion logam senyawa pirazolina 3A dan 6A	111
IV.5.8 Analisis DFT dengan dan tanpa ion logam senyawa pirazolina 3B dan 6B	114
IV.5.9 Analisis DFT dengan dan tanpa ion logam senyawa pirazolina 3C dan 6C	117
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	120
V.1 Kesimpulan.....	120
V.2 Saran	120
DAFTAR PUSTAKA	121
LAMPIRAN.....	139