

## DAFTAR ISI

	Halaman
<b>HALAMAN JUDUL</b>	i
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b>	ii
<b>PERNYATAAN</b>	iii
<b>PRAKATA</b>	iv
<b>DAFTAR ISI</b>	v
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	vii
<b>DAFTAR TABEL</b>	ix
<b>INTISARI</b>	ix
<b>ABSTRACT</b>	x
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Rumusan Masalah	3
I.3 Tujuan Penelitian	3
I.4 Manfaat Penelitian	4
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN RUMUSAN HIPOTESIS</b>	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Logam tanah jarang dan pemisahannya	5
II.1.2 Cairan ionik di dalam proses ekstraksi logam tanah jarang	6
II.1.3 Metode teori fungsi kerapatan	9
II.1.4 Himpunan basis	10
II.1.5 Analisis topologi melalui metode <i>atom in molecule</i>	11
II.1.6 Parameter metode <i>atom in molecule</i> (AIM)	12
II.1.7 Pengaruh substituen dan karakterisasi ikatan	14
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	15
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	15
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	16
II.2.3 Rancangan penelitian	16
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	19
III.1 Alat	19
III.1.1 Perangkat keras	19
III.1.2 Perangkat lunak	19
III.2 Bahan Kajian	19
III.3 Prosedur Kerja	20
III.3.1 Optimasi geometri dan verifikasi perhitungan	20
III.3.2 Optimasi struktur kompleks tersubstitusi	20
III.3.3 Optimasi ekstraktan dengan logam La(III)	21
III.3.4 Perhitungan analisis <i>atom in molecule</i> (AIM)	21
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	22
IV.1 Penentuan Metode Perhitungan	22
IV.2 Sifat dan Struktur Kompleks $[Y(OCTPOA)(H_2O)_5]^{2+}$ Tersubstitusi	24
IV.3 Pendekatan <i>Atom In Molecule</i> (AIM)	26
IV.3.1 Karakteristik ikatan Y-O <sub>eks</sub>	27



IV.3.2 Penentuan substituen terbaik	29
IV.4 Nilai Energi dan Selisih Energi HOMO-LUMO	31
IV.5 Kajian Pemisahan Logam Y(III) dengan La(III)	32
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b>	35
V.1 Kesimpulan	35
V.2 Saran	35
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	36
<b>LAMPIRAN</b>	40