

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN	iii
MOTTO DAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	ix
INTISARI	x
ABSTRACT	xi
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Rumusan Masalah	4
I.3 Tujuan Penelitian	4
I.4 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN RUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka.....	5
II.1.1 Unsur logam tanah jarang dan potensinya.....	5
II.1.2 Pemisahan unsur logam tanah jarang	6
II.1.3 Teori atom dalam molekul (<i>atom in molecule theory</i>)	8
II.1.4 Peranan substituen dalam ekstraktan.....	9
II.1.5 Metode DFT dan fungsi <i>hybrid</i> B3LYP.....	10
II.1.6 Himpunan basis	13
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	14
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	14
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	14
II.2.3 Rancangan penelitian	15
BAB III METODE PENELITIAN	16
III.1 Bahan	16
III.2 Peralatan	16
III.3 Prosedur Penelitian	17
III.3.1 Penentuan metode penelitian	17
III.3.2 Optimasi geometri.....	17
III.3.3 Perhitungan dan analisis data.....	18

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	19
IV. 1 Penentuan Metode Perhitungan.....	19
IV. 2 Sifat dan Struktur Kompleks $[Y(RPOA)(H_2O)_5]^{2+}$	20
IV. 3 Karakteristik Ikatan Y-O _{fenoksiasetat}	23
IV. 4 Penentuan Substituen Terbaik.....	25
IV. 5 Selektivitas Ekstraktan terhadap Ion Logam Y(III) dan Sc(III).....	28
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	31
V. 1 Kesimpulan.....	31
V. 2 Saran.....	31
DAFTAR PUSTAKA.....	32
LAMPIRAN.....	36

DAFTAR GAMBAR

Gambar II.1 Struktur CA12, HOCTPOA, dan $[N_{1888}][OCTPOA]$	7
Gambar II.2 Struktur kompleks ekstraksi $[N_{1888}][OCTPOA]$ dan ion Y^{3+}	8
Gambar III.1 Struktur 2D $[Y(OCTPOA)(H_2O)_5]^{2+}$ (Guo dkk., 2017)	16
Gambar IV. 1 Struktur teroptimasi geometri $[Y(OCTPOA)(H_2O)_5]^{2+}$	21
Gambar IV. 2 Struktur Kompleks $[Y(OCH_3POA)(H_2O)_5]^{2+}$	28

DAFTAR TABEL

Tabel IV. 1 Perbandingan panjang ikatan $[Y(OCTPOA)(H_2O)_5]^{2+}$ pada metode komputasi dengan metode eksperimen	20
Tabel IV. 2 Muatan parsial Mulliken pada ion logam Y(III) dalam kompleks $[Y(RPOA)(H_2O)_5]^{2+}$	22
Tabel IV. 3 Nilai rerata densitas elektron (ρ), Laplacian ($\nabla^2\rho$), serta energi elektronik (H) pada titik kritis ikatan Y(III)-O _{fenoksiasetat} dalam kompleks $[Y(RPOA)(H_2O)_5]^{2+}$	24
Tabel IV. 4 Nilai tingkat energi orbital pada molekul kompleks $[Y(RPOA)(H_2O)_5]^{2+}$	26
Tabel IV. 5 Nilai derajat ikat atom O _{fenoksiasetat} dengan ion logam Y(III) pada molekul kompleks $[Y(RPOA)(H_2O)_5]^{2+}$	27
Tabel IV. 6 Hasil analisis teori AIM pada kompleks $[Y(OCTPOA)(H_2O)_5]^{2+}$ dengan kompleks $[Sc(OCTPOA)(H_2O)_5]^{2+}$	29