

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	ii	
HALAMAN PENGESAHAN	iii	
PERNYATAAN	iv	
PRAKATA	v	
DAFTAR ISI	vii	
DAFTAR GAMBAR	ix	
DAFTAR TABEL	x	
DAFTAR LAMPIRAN	xi	
INTISARI	xii	
ABSTRACT	xiii	
BAB I	PENDAHULUAN	1
	I.1 Latar Belakang	1
	I.2 Rumusan Masalah	2
	I.3 Tujuan Penelitian	3
	I.4 Manfaat Penelitian	3
	I.5 Batasan Masalah	3
BAB II	TINJAUNAN PUSTAKA	4
	II.1 Zirkonium dan Hafnium	4
	II.2 Organofosfor	5
	II.3 Ekstraksi Menggunakan Organofosfor	5
	II.4 Kompleks Zr(IV) dan Hf(IV)	6
	II.5 Metode DFT	6
	II.6 Fungsi B3LYP	7
	II.7 Himpunan Basis	7
	II.8 Himpunan Basis LanL2DZ ECP	9
BAB III	LANDASAN TEORI, HIPOTESIS DAN RANCANGAN PENELITIAN	10
	III.1 Landasan Teori	10
	III.2 Hipotesis	11
	III.3 Rancangan Penelitian	13
BAB IV	METODE PENELITIAN	16
	IV.1 Waktu dan Tempat Penelitian	16
	IV.2 Alat	16
	IV.2.1 Perangkat Keras	16
	IV.2.2 Perangkat Lunak	16
	IV.3 Bahan Kajian	16
	IV.4 Prosedur Penelitian	16
	IV.4.1 Optimasi Ion Zr(IV), Hf(IV), Cl ⁻ , dan Molekul air (H ₂ O)	16
	IV.4.2 Optimasi Organofosfor (O=P(OR) ₃), (O=PR'(OR) ₂)	

	(O=PR' ₂ OR) dan (O=PR' ₃)	17
	IV.4.3 Optimasi Kompleks MCl ₄ •2(H ₂ O), MCl ₄ •L(H ₂ O), MCl ₄ •2L	17
	IV.4.4 Penentuan Energi Interaksi	19
	IV.4.5 Penentuan Organofosfor yang Paling kuat Berinteraksi dengan Zr(IV) dan Hf(IV)	19
	IV.4.6 Penentuan Logam yang Lebih Mudah Terekstraksi	19
BAB V	HASIL DAN PEMBAHASAN	20
	V.1 Pengaruh Substituen R pada Senyawa Organofosfor	21
	V.2 Interaksi Model Organofosfor dengan Logam Inti	23
	V.2.1 Muatan Logam Inti dan Organofosfor	24
	V.2.2 Jarak Logam Inti dan Organofosfor	25
	V.3 Model Kompleks Zr(VI) dan Hf(IV)	28
	V.2.1 Energi interaksi ZrCl ₄ •LH ₂ O dan HfCl ₄ •LH ₂ O	29
	V.2.1 Energi interaksi ZrCl ₄ •2L dan HfCl ₄ •2L	30
	V.2.1 Kestabilan Kompleks Zr(IV) dan Hf(IV)	31
BAB VI	KESIMPULAN DAN SARAN	34
	VI.1 Kesimpulan	34
	VI.2 Saran	34
	DAFTAR PUSTAKA	35
	LAMPIRAN	38

DAFTAR GAMBAR

Gambar II.1	Rumus umum organofosfor	5
Gambar II.2	Kompleks $Zr \cdot 6CO$ dan $Zr \cdot 8H_2O$	6
Gambar II.3	Himpunan basis STO dan GTO	8
Gambar III.1	Keseimbangan Air, piruvat dan TBP	10
Gambar III.2	Model kompleks untuk fosfat	14
Gambar III.3	Model organofosfor sebagai ligan	14
Gambar IV.1	Model Kompleks $MCl_4 \cdot 2(H_2O)$	18
Gambar IV.2	Model Kompleks $MCl_4 \cdot L(H_2O)$	18
Gambar IV.3	Model Kompleks $MCl_4 \cdot 2L$	18
Gambar V.1	Senyawa organofosfor teroptimasi	22
Gambar V.2	Energi interaksi kompleks $ZrCl_4 \cdot L(H_2O)$	30
Gambar V.3	Energi interaksi kompleks $MCl_4 \cdot 2L$	31
Gambar V.4	Energi interaksi kompleks Zr	33

DAFTAR TABEL

Tabel V.1 Muatan atom O dan P dari senyawa organofosfor teroptimasi	23
Tabel V.2 Muatan O dan P pada kompleks $ZrCl_4 \cdot L(H_2O)$	25
Tabel V.3 Muatan O dan P pada kompleks $ZrCl_4 \cdot 2L$	26
Tabel V.4 Jarak P-O dan M-O pada kompleks $ZrCl_4 \cdot L(H_2O)$	27
Tabel V.5 Jarak P-O dan M-O pada kompleks $MCl_4 \cdot 2L$	28
Tabel V.6 Energi interaksi kompleks $MCl_4 \cdot L(H_2O)$	30
Tabel V.7 Energi interaksi kompleks $MCl_4 \cdot 2L$	31
Tabel V.8 Energi interaksi kompleks Zr dan Hf	32

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1.	Himpunan Basis LanL2DZ ECP	38
Lampiran 2.	Langkah-Langkah Mengoptimasi Kompleks Zr dan Hf dengan Metode DFT	43
Lampiran 3.	Energi Total dari Hasil Optimasi Kompleks Zr dan Hf	46
Lampiran 4.	Energi Interaksi dari Kompleks Zr dan Hf	47
Lampiran 5.	Pengaruh Organofosfor terhadap Energi Interaksi Komplek	48
Lampiran 6.	Muatan Organofosfor dalam Kompleks	50
Lampiran 7.	Jarak Organofosfor dengan Logam (Angstrom)	51
Lampiran 8.	Perhitungan Energi Interaksi	52
Lampiran 9.	Kompleks $MCl_4 \cdot 2(H_2O)$	54
Lampiran 10.	Kompleks $MCl_4 \cdot L(H_2O)$	55
Lampiran 11.	Kompleks $MCl_4 \cdot 2L$	57
Lampiran 12.	Kerapatan Elektron Organofosfor	59