

DAFTAR ISI

HALAMAN AWAL	i
PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN	iii
PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
INTISARI	xii
ABSTRACT	xiii
PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Rumusan Masalah	6
I.3 Tujuan Penelitian	6
I.4 Manfaat Penelitian	7
TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	8
II.1 Tinjauan Pustaka	8
II.1.1 Pemodelan Molekul	8
II.1.2 Teori fungsional kerapatan	10
II.1.3 Kompleks eter mahkota-kation	11
II.1.4 Mikrosolvasi	15
II.1.5 <i>Polarized Continuum Model</i>	19
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	19
II.2.1 Dasar pemikiran 1	19
II.2.2 Dasar pemikiran 2	20
II.2.3 Dasar pemikiran 3	20

II.2.4	Rancangan penelitian	20
METODE PENELITIAN		22
III.2.1	Optimasi struktur kompleks $[M^{2+} \cdot (\text{benzo15-mahkota-5})]$	22
III.2.2	Optimasi struktur kompleks $[H_2O \cdot M^{2+} \cdot (\text{benzo15-mahkota-5})]$	24
III.2.3	Optimasi struktur kompleks $[2H_2O \cdot M^{2+} \cdot (\text{benzo15-mahkota-5})]$	25
III.2.4	Pemodelan pengaruh PCM	24
III.2.5	Analisis hasil	24
HASIL DAN PEMBAHASAN		26
IV.1	Kompleks 15-mahkota-5 dengan kation logam	26
IV.2	Kompleks $[Ni^{2+} \cdot \text{benzo-15-mahkota-5}]$ tersubstitusi	35
IV.2.1	Parameter struktur	36
IV.2.2	Parameter energetika	38
IV.2.3	Muatan atom	42
IV.2.4	Pengaruh mikrosolvasi	45
IV.2.5	Pengaruh pelarut dengan PCM	49
IV.3	Kompleks $[Co^{2+} \cdot \text{benzo-15-mahkota-5}]$ tersubstitusi	51
IV.3.1	Parameter energetika	52
IV.3.2	Parameter struktur	53
IV.3.3	Muatan atom	56
IV.3.4	Pengaruh mikrosolvasi	59
IV.3.5	Pengaruh pelarut dengan PCM	61
KESIMPULAN DAN SARAN		
V.1	Kesimpulan	67
V.2	Saran	68
DAFTAR PUSTAKA		69
LAMPIRAN		72

DAFTAR GAMBAR

Gambar II.1	Struktur tiga dimensi kompleks eter mahkota-kation	13
Gambar II.2	Struktur tiga dimensi eter mahkota-kation-air	16
Gambar II.3	Polarized Continuum Model	17
Gambar III.1	Kompleks $[M^{2+}.Benzo15-mahkota-5]$	22
Gambar IV.1	Struktur kompleks $[M^{2+}(15-mahkota-5)]$	26
Gambar IV.2	Struktur $[Ni^{2+}.15-mahkota-5]$ tampak samping sebelum (a) dan sesudah (b) optimasi geometri	27
Gambar IV.3	Penomoran pada struktur kompleks benzo-15-mahkota-5-kation	28
Gambar IV.4	Hasil optimasi benzo-15-mahkota-5 tampak dari (a) atas dan (b) Samping	30
Gambar IV.5	Struktur kompleks $[Ni^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ tersubstitusi tampak (a) atas dan (b) samping serta struktur kompleks $[Co^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ tersubstitusi tampak (c) atas dan (d) samping	31
Gambar IV.6	Korelasi antara stabilitas kompleks dengan ukuran kation	33
Gambar IV.7	Hasil optimasi geometri kompleks $[Ni^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ Tersubstitusi	36
Gambar IV.8	Jarak ikat Ni-O dalam kompleks $[Ni^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ Tersubstitusi	36
Gambar IV.9	Energi interaksi kompleks $[Ni^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ Tersubstitusi	39
Gambar IV.10	Korelasi energi interaksi kompleks $[Ni^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ tersubstitusi dengan kavitasi	40
Gambar IV.11	Gambar orbital HOMO-LUMO (a) $[Ni^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ $[Ni^{2+}.benzo-15-mahkota-5-CH_2CH_3]$ (c) $[Ni^{2+}.benzo-15-mahkota-5.COOH]$	41
Gambar IV.12	Muatan atom oksigen pada cincin kompleks $[Ni^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ tersubstitusi	43
Gambar IV.13	Korelasi antara transfer muatan dengan energi interaksi kompleks $[Ni^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ tersubstitusi	45

Gambar IV.14 Struktur kompleks $[2H_2O.Ni^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$	45
Gambar IV.15 Energi interaksi kompleks $[2H_2O.Ni^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ tersubstitusi	46
Gambar IV.16 Perbandingan energi interaksi kompleks $[Ni^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ tersubstitusi dengan mikrosolvasi dan PCM	49
Gambar IV.17 Hasil optimasi geometri kompleks $[Co^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ tersubstitusi	52
Gambar IV.18 Energi interaksi kompleks $[Co^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ tersubstitusi	53
Gambar IV.19 Jarak Co-O pada kompleks $[Co^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ tersubstitusi	55
Gambar IV.20 Korelasi antara jejari kavitas dengan energi interaksi	56
Gambar IV.21 Muatan atom oksigen pada kompleks $[Co^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ tersubstitusi	57
Gambar IV.22 Orbital HOMO-LUMO kompleks a) $[Co^{2+}.benzo-15-mahkota-5-CH_3]$ b) $[Co^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ c) $[Co^{2+}.benzo-15-mahkota-5-COOH]$	58
Gambar IV.23 Struktur kompleks $[2H_2O.Co^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ tersubstitusi	59
Gambar IV.24 Perbandingan energi interaksi kompleks $[Co^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ tersubstitusi dengan $[2H_2O.Co^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ tersubstitusi	61
Gambar IV.25 Perbandingan energi interaksi model PCM dengan model Mikrosolvasi	62
Gambar IV.26 Energi interaksi kompleks $[Co^{2+}.benzo-15-mahkota-5]$ tersubstitusi dengan model PCM	64

DAFTAR TABEL

Tabel IV.1	Perbandingan panjang ikatan (\AA) dari $[M^{2+}(\text{H}_2\text{O})_2(15\text{-mahkota-5})]$ perhitungan teoritis dengan eksperimen	25
Tabel IV.2	Kavitas $[M^{2+}.15\text{-mahkota-5}]$ hasil perhitungan dibandingkan dengan hasil eksperimen	27
Tabel IV.3	Energi interaksi kompleks benzo-15-mahkota-5 dengan beberapa jenis kation	32
Tabel IV.4	Perhitungan jari-jari kavitas eter mahkota	33
Tabel IV.5	Kavitas kompleks $[Ni^{2+}.\text{benzo-15-mahkota-5}]$ tersubstitusi	37
Tabel IV.6	Parameter sudut ikat dan sudut dihedral struktur kompleks $[Ni^{2+}.\text{benzo-15-mahkota-5}]$ tersubstitusi	38
Tabel IV.7	Transfer muatan atom Ni^{2+} pada kompleks $[Ni^{2+}.\text{benzo-15-mahkota-5}]$ tersubstitusi dengan muatan awal Ni sebesar +2	44
Tabel IV.8	Jarak $M-O_{\text{air}}$ pada kompleks $[2\text{H}_2\text{O}.\text{benzo-15-mahkota-5}]$ tersubstitusi	47
Tabel IV.9	Perbandingan rata-rata jarak M-O eter mahkota pada kompleks $[Ni^{2+}.\text{benzo-15-mahkota-5}]$ dengan $[2\text{H}_2\text{O}.Ni^{2+}.\text{benzo-15-mahkota-5}]$	48
Tabel IV.10	Nilai momen dipol (D) ligan pada kompleks $[Ni^{2+}.\text{benzo-15-mahkota-5}]$	51
Tabel IV.11	Parameter struktur kompleks $[Co^{2+}.\text{benzo-15-mahkota-5}]$ tersubstitusi	55
Tabel IV.12	Transfer muatan Co^{2+} dalam kompleks $[Co^{2+}.\text{benzo-15-mahkota-5}]$	58
Tabel IV.13	Jarak Co-O (H_2O) pada kompleks $[2\text{H}_2\text{O}.Co^{2+}.\text{benzo-15-mahkota-5}]$ tersubstitusi	61
Tabel IV.14	Perbandingan jarak ikat Co-O pada cincin eter mahkota antara kompleks $[Co^{2+}.\text{benzo-15-mahkota-5}]$ tersubstitusi dengan $[(\text{H}_2\text{O})_2.Co^{2+}.\text{benzo-15-mahkota-5}]$ tersubstitusi	62
Tabel IV.15	Nilai momen dipole (D) pada kompleks ligan $[Co^{2+}.\text{benzo-15-mahkota-5}]$ tersubstitusi	65

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1.	Energi interaksi kompleks $[\text{Ni}^{2+}.\text{benzo-15-mahkota-5}]$ tersubstitusi (atas) dan $[\text{Co}^{2+}.\text{benzo-15-mahkota-5}]$ tersubstitusi (bawah)	72
Lampiran 2.	Jarak M-O kompleks $[\text{Ni}^{2+}.\text{Bz15C5}]$ dan $[\text{Co}^{2+}.\text{Bz15C5}]$ tersubstitusi	73
Lampiran 3.	Parameter struktur kompleks	74
Lampiran 4.	Muatan atom oksigen kompleks $[\text{Ni}^{2+}.\text{Bz15C5}]$ tersubstitusi (atas) dan $[\text{Co}^{2+}.\text{Bz15C5}]$ tersubstitusi (bawah)	75
Lampiran 5.	Energi interaksi kompleks $[(\text{H}_2\text{O})_2.\text{Ni}^{2+}.\text{Bz15C5}]$ tersubstitusi dan $[(\text{H}_2\text{O})_2.\text{Co}^{2+}.\text{Bz15C5}]$ tersubstitusi	76
Lampiran 6.	Energi interaksi kompleks $[\text{Ni}^{2+}.\text{benzo-15-mahkota-5}]$ tersubstitusi dan $[\text{Co}^{2+}.\text{Bz15C5}]$ tersubstitusi dalam model PCM	77
Lampiran 7.	Kompleks $[(\text{H}_2\text{O})_2.\text{Co}^{2+}.\text{Bz15C5}]$	78
Lampiran 8.	Kompleks $[(\text{H}_2\text{O})_2.\text{Ni}^{2+}.\text{Bz15C5}]$	79