

## DAFTAR ISI

<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>	viii
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b>	ix
<b>INTISARI</b>	x
<b>ABSTRACT</b>	xi
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	1
I.1 Latar Belakang dan Permasalahan	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	3
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS</b>	5
II.1 Senyawa Kalkon	5
II.2 Senyawa Sensor	5
II.3 Pengaruh Anion dan Sensornya	7
II.3.1 Anion halida	8
II.3.2 Anion sianida	9
II.3.3 Anion asetat	10
II.3.4 Anion nitrat	11
II.3.5 Anion bikarbonat	12
II.3.6 Anion hidrogen sulfat	13
II.4 Kimia Komputasi	13
II.4.1 Metode <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	14
II.4.2 Komputasi spektroskopi	16
II.5 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	17
II.5.1 Perumusan hipotesis I	17
II.5.2 Perumusan hipotesis II	18
II.5.3 Perumusan hipotesis III	19
II.5.4 Rancangan penelitian	19
<b>BAB III METODOLOGI PENELITIAN</b>	20
III.1 Tempat Penelitian	20
III.2 Alat dan Bahan Penelitian	20
III.2.1 Alat penelitian	20
III.2.2 Bahan penelitian	20
III.3 Prosedur Penelitian	21
III.3.1 Pemilihan metode perhitungan	21
III.3.2 Prediksi model interaksi molekul sensor-anion	22

III.3.3 Perhitungan energi interaksi molekul sensor-anion	22
III.3.4 Perhitungan transisi elektronik	22
III.3.5 Perhitungan spektra UV-Vis	23
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	24
IV.1 Validasi Metode Komputasi	24
IV.2 Pengaruh Struktur Terhadap Interaksi Molekul Sensor-Anion	26
IV.2.1 Molekul sensor tanpa penambahan gugus ( $Ar_1$ -OH)	27
IV.2.2 Molekul sensor dengan gugus pemberi elektron ( $Ar_2$ -OH dan $Ar_3$ -OH)	28
IV.2.3 Molekul sensor dengan gugus penarik elektron ( $Ar_4$ -OH dan $Ar_5$ -OH)	30
IV.3 Perbandingn Interaksi Molekul Sensor-Anion	33
IV.4 Energi Interaksi Molekul Sensor-Anion	36
IV.5 Analisis Transisi Elektronik	37
IV.6 Analisis Prediksi Spektra UV-Vis	39
<b>BAB V KESIMPULAN</b>	46
V.1 Kesimpulan	46
V.2 Saran	46
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	47
<b>LAMPIRAN</b>	55

## DAFTAR GAMBAR

<b>Gambar I.1</b>	Struktur senyawa kalkon sebagai sensor	3
<b>Gambar II.1</b>	Skema interaksi sensor dan anion	6
<b>Gambar III.1</b>	Struktur senyawa sensor turunan kalkon hidroksi ( <b>Ar<sub>n</sub>-OH</b> )	21
<b>Gambar IV.1</b>	Sruktur dan pelabelan senyawa turunan kalkon hasil penelitian Fitriana (2014)	24
<b>Gambar IV.2</b>	Model interaksi molekul sensor dan anion, (a) panjang ikatan O-H (b) jarak H---anion (c) sudut antara O-H---anion	27
<b>Gambar IV.3</b>	FMOs <b>Ar<sub>1</sub>-OH</b> dan <b>Ar<sub>1</sub>-O<sup>-</sup></b>	38
<b>Gambar IV.4</b>	Prediksi spektra UV-Vis pada pelarut DMSO, (a) <b>Ar-OH</b> tersubstitusi (b) <b>Ar-OH</b> tersubstitusi dengan anion Cl <sup>-</sup> , Br <sup>-</sup> , NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> dan HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	40
<b>Gambar IV.5</b>	Prediksi spektra UV-Vis pada pelarut DMSO, (a) <b>AR-O<sup>-</sup></b> tersubstitusi (b) <b>AR-O<sup>-</sup></b> tersubstitusi dengan anion F <sup>-</sup> , CN <sup>-</sup> , CH <sub>3</sub> COO <sup>-</sup> dan HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	41
<b>Gambar IV.6</b>	Prediksi spektra UV-Vis pada pelarut metanol, (a) <b>Ar-OH</b> tersubstitusi (b) <b>Ar-OH</b> tersubstitusi dengan anion Cl <sup>-</sup> , Br <sup>-</sup> , NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> dan HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	42
<b>Gambar IV.7</b>	Prediksi spektra UV-Vis pada pelarut metanol, (a) <b>AR-O<sup>-</sup></b> tersubstitusi (b) <b>AR-O<sup>-</sup></b> tersubstitusi dengan anion F <sup>-</sup> , CN <sup>-</sup> , CH <sub>3</sub> COO <sup>-</sup> dan HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	43

## DAFTAR TABEL

<b>Tabel IV.1</b>	Perbandingan nilai pergeseran kimia $^1\text{H-NMR}$	25
<b>Tabel IV.2</b>	Parameter geometri sensor <b>Ar<sub>1</sub>-OH</b> dan anion (A)	28
<b>Tabel IV.3</b>	Parameter geometri sensor <b>Ar<sub>2</sub>-OH</b> dan anion (A)	29
<b>Tabel IV.4</b>	Parameter geometri sensor <b>Ar<sub>3</sub>-OH</b> dan anion (A)	30
<b>Tabel IV.5</b>	Parameter geometri sensor <b>Ar<sub>4</sub>-OH</b> dan anion (A)	31
<b>Tabel IV.6</b>	Parameter geometri sensor <b>Ar<sub>5</sub>-OH</b> dan anion (A)	32
<b>Tabel IV.7</b>	Energi interaksi sensor <b>Ar-OH</b> tersubstitusi-anion $\Delta E$ (kJ/mol)	36
<b>Tabel IV.8</b>	Energi HOMO-LUMO (eV) dan selisih energi HOMO-LUMO ( $\Delta E_{\text{H-L}}$ )	39
<b>Tabel IV.9</b>	Panjang gelombang absorpsi ( $\lambda_{\text{abs}}$ ), <i>oscillator strength</i> ( <i>f</i> ) sensor <b>Ar-OH</b> dan <b>Ar-O<sup>-</sup></b> tersubstitusi pada pelarut DMSO	45
<b>Tabel IV.10</b>	Panjang gelombang absorpsi ( $\lambda_{\text{abs}}$ ), <i>oscillator strength</i> ( <i>f</i> ) sensor <b>Ar-OH</b> dan <b>Ar-O<sup>-</sup></b> tersubstitusi pada pelarut metanol	45

## DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1	Perhitungan energi interaksi sensor <b>Ar<sub>1</sub>-OH</b> -anion	53
Lampiran 2	Perhitungan energi interaksi sensor <b>Ar<sub>2</sub>-OH</b> -anion	54
Lampiran 3	Perhitungan energi interaksi sensor <b>Ar<sub>3</sub>-OH</b> -anion	55
Lampiran 4	Perhitungan energi interaksi sensor <b>Ar<sub>4</sub>-OH</b> -anion	56
Lampiran 5	Perhitungan energi interaksi sensor <b>Ar<sub>5</sub>-OH</b> -anion	57
Lampiran 6	Interaksi sensor <b>Ar<sub>1</sub>-OH</b> dan anion	60
Lampiran 7	Interaksi sensor <b>Ar<sub>2</sub>-OH</b> dan anion	61
Lampiran 8	Interaksi sensor <b>Ar<sub>3</sub>-OH</b> dan anion	62
Lampiran 9	Interaksi sensor <b>Ar<sub>4</sub>-OH</b> dan anion	63
Lampiran 10	Interaksi sensor <b>Ar<sub>5</sub>-OH</b> dan anion	64
Lampiran 11	Nilai konstanta keasaman dari anion	65
Lampiran 12	<i>Frontier Molecular Orbitals</i> (FMOs) sensor <b>Ar<sub>1</sub>-OH</b> dan <b>Ar<sub>2</sub>-OH</b>	66
Lampiran 13	<i>Frontier Molecular Orbitals</i> (FMOs) sensor <b>Ar<sub>3</sub>-OH</b> dan <b>Ar<sub>4</sub>-OH</b>	67
Lampiran 14	<i>Frontier Molecular Orbitals</i> (FMOs) sensor <b>Ar<sub>5</sub>-OH</b>	68
Lampiran 15	Contoh <i>log file</i> hasil optimasi geometri senyawa sensor <b>Ar-OH</b>	69
Lampiran 16	Contoh <i>log file</i> hasil pergeseran kimia <sup>1</sup> H-NMR senyawa sensor <b>Ar-OH</b>	73
Lampiran 17	Contoh <i>log file</i> hasil optimasi geometri senyawa sensor <b>Ar-OH</b> -anion	77
Lampiran 18	Contoh <i>log file</i> hasil perhitungan transisi elektronik sensor <b>Ar-OH</b>	81