

No	2	
Nama	<b>MUHAMMAD ARIEFUDDIN</b>	
No Mhs	97/114014/PA/6969	
Pembimbing I	Dr. Harno Dwi Pranowo, M.Si	
Pembimbing II	Drs. Iqmal Tahir, M.Si	
Skripsi	<b>PENGARUH SUBSTITUEN PADA ETER MAHKOTA 16C5 TERHADAP SELEKTIVITAS PERKATIONAN ION NATRIUM DENGAN MENGGUNAKAN METODA SEMIEMPIRIS MNDO/d</b>	
Abstrak	<p>Selektivitas molekul eter mahkota kompleks Na<sup>+</sup>.(16C5) telah dipelajari dan ditentukan melalui optimasi molekul dengan menggunakan metode semiempiris MNDO/d. Pengaruh substituen yang terikat pada eter mahkota yaitu -OH, -OCH<sub>2</sub>COOH, -CH<sub>3</sub>, -CHO, -COOH dan -OCH<sub>3</sub> terhadap selektivitas 16C5 terhadap ion logam Na + juga dilakukan.</p> <p>Pilihan metode semiempiris dilakukan dengan <i>trial and error</i> terhadap seluruh metode yang tersedia. Untuk optimasi eter mahkota 16C5 tersubstitusi yang mengikat ion logam Na<sup>+</sup>. Hasil terbaik dilakukan dengan metode <i>MNDO/d</i>.</p> <p>Variasi substituen dilakukan guna didapatkan bentuk konformasi molekul eter mahkota 16C5 paling stabil, yaitu bila energi ikat terhadap ion logam Na<sup>+</sup> paling besar (negatif). Selektivitas eter mahkota 16C5 dapat ditentukan melalui perbandingan bentuk konformasi yang secara empiris dapat diamati melalui besar panjang ikatan, sudut ikat dan sudut torsi struktur molekul. Selain itu sebagai parameter pembanding lain disertakan juga informasi yang berkaitan dengan jenis substituen dan besar energi ikat. Besar energi ikat untuk masing-masing model molekul didapatkan dengan perhitungan besar energi molekul hasil optimasi eter mahkota 16C5 tersubstitusi dalam keadaan berikatan dengan ion logam Na<sup>+</sup> dikurangi dengan energi ikat ion logam Na<sup>+</sup> dan energi ikat eter mahkota 16C5 dalam keadaan tak terikat yang dirumuskan dengan <math>E_{ikat} = E_{komp/eks} - (E_{Na^+} + E_{eter mahkota})</math>. Selektivitas eter mahkota 16C5 dalam penelitian ini didapatkan untuk struktur yang tersubstitusi dengan -COOH dengan <math>E_{ikat} = -38.1881355</math> kkal/mol.</p>	