


No	20	
Nama	SISKA HAMDANI	
No Mhs	02/163965/EPA/0354	
Pembimbing I	Dr. Karna Wijaya, M.Eng	
Pembimbing II	Drs. Iqmal Tahir, M.Si	
Skripsi	KAJIAN TEORITIS SELEKTIVITAS <i>THIACROWN ETHER</i> 18S6 DAN 18-UT-6 TERHADAP SENYAWA LOGAM TRANSISI CF₃COOAg DAN CdCl₂ DENGAN METODE SEMIEMPIRIK ZINDO/1	
Abstrak	<p>Telah dilakukan kajian teoritis penentuan selektivitas <i>thiacrown ether</i> jenuh 1,4,7,10,13,16-heksatiasiklooktadekana (18S6) dan tak jenuh 1,4,7,10,13,16-heksatiasiklooktadekana (18-UT-6) terhadap senyawa-senyawa logam transisi CF₃COOAg dan CdCl₂ dengan metode semiempirik ZINDO/1 berdasarkan energi ikat dan struktur geometri kompleksnya.</p> <p>Hasil optimisasi geometri kompleks <i>thiacrown ether</i> dengan senyawa logam transisi berbasis metode ZINDO/1 menunjukkan bahwa senyawa CF₃COOAg memiliki selektivitas yang lebih tinggi terhadap <i>thiacrown ether</i> cincin 18 jenuh dan tak jenuh jika dibandingkan dengan senyawa CdCl₂. Pada senyawa logam transisi yang sama, <i>thiacrown ether</i> tak jenuh 18-UT-6 menunjukkan selektivitas yang lebih tinggi jika dibandingkan dengan <i>thiacrown ether</i> jenuh 18S6. Secara umum hasil penelitian teoritis dengan metode semiempirik ZINDO/1 yang telah dilakukan menunjukkan kecenderungan yang hampir sama dengan data eksperimen <i>X-Ray Crystallography</i>.</p>	