


| | | |
|---------------|---|---|
| No | 9 |  |
| Nama | JEFRY JATIUTOMO | |
| No Mhs | 97/114214/PA/7024 | |
| Pembimbing I | Dr. Harno Dwi Pranowo, M.Si | |
| Pembimbing II | Drs. Iqmal Tahir, M.Si | |
| Skripsi | KAJIAN TEORITIS PENGARUH SUBSTITUEN TERHADAP GEOMETRI MOLEKUL KOMPLEKS Na⁺.(B15C5) MENGGUNAKAN METODE SEMIEMPIRIK MNDO/d | |
| Abstrak | <p>Telah dilakukan kajian pengaruh penambahan substituen terhadap selektivitas dari molekul eter benzo15-mahkota-5 (B15C5) dalam pengompleksan ion logam natrium. Substituen yang digunakan adalah -CH₃, -CH=CH₂, -OH, -CHO, dan -COOH.</p> <p>Perhitungan sifat kompleks ion logam-eter mahkota dilakukan dengan menggunakan metode semiempirik. Untuk mendapatkan bentuk geometri yang terbaik dilakukan <i>trial and error</i> menggunakan semua metode semiempirik yang terdapat dalam program <i>Hyperchem 6.0</i>. Terpilih metode MNDO/d dengan hasil yang maksimal.</p> <p>Hasil optimasi geometri menunjukkan bahwa substituen yang bersifat penarik elektron akan menurunkan energi ikatannya, sedangkan substituen yang bersifat pemberi elektron akan menaikkan energi ikatannya (harga energi semakin negatif). Energi terbesar dihasilkan oleh substituen -CH=CH₂ dengan besar energi -76,0252 kkal/mol, dengan jari-jari rongga 2,277 Å. Jadi senyawa eter B15C5 mempunyai selektivitas yang tinggi dengan adanya substituen -CH=CH₂ yang bersifat donor elektron.</p> | |