

No	3	
Nama	FERRY JAYA SAPUTRO KURNIAWAN	
No Mhs	97/113522/PA/6854	
Pembimbing I	Dr. Harno Dwi Pranowo, M.Si	
Pembimbing II	Drs. Iqmal Tahir, M.Si	
Skripsi	MEMPELAJARI PENGARUH SUBSTITUEN PADA KONFORMASI DAN SELEKTIVITAS DB15C5.2H₂O-TERSUBSTITUSI TERHADAP ION Na⁺: KAJIAN TEORITIS MENGGUNAKAN METODE SEMI EMPIRIK MNDO/d	
Abstrak	<p>Telah dilakukan penelitian tentang pengaruh penambahan substituen terhadap struktur kompleks eter DB15C5.2H₂O-tersubstitusi dengan ion logam Na⁺. Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan informasi konformasi geometri DB15C5.2H₂O-tersubstitusi dan selektivitasnya dalam mengompleks kation logam Na⁺.</p> <p>Penelitian ini menggunakan metode semi empirik MNDO/d yang terdapat dalam program <i>HyperChem 6.0</i>. Batasan panjang ikatan H₂O-Na⁺-H₂O sebesar 2,3 Å dan sudut ikatnya sebesar 180° digunakan untuk meningkatkan kualitas optimasi geometri.</p> <p>Hasil optimasi geometri menunjukkan bahwa substituen-substituen penarik elektron memberikan harga energi interaksi yang lebih besar dibanding substituen donor elektron. Kestabilan terbaik diberikan oleh substituen donor elektron yang ditunjukkan oleh harga energi interaksinya yang rendah. Substituen yang memberikan harga energi interaksi terendah, -632,6371 kkal.mol⁻¹, dengan jejari rongga eter mahkota 2,3273 Å, yaitu substituen -CH(OH)CH₃. Penurunan muatan kation yang rendah menunjukkan semakin kuatnya kation terikat pada ligan. Nilai muatan kation yang terendah, 0,0623, diberikan oleh kompleks dengan substituen -CH(OH)CH₃. Aspek lain yang juga diteliti untuk meningkatkan kualitas permodelan adalah adalah rigiditas, dan keplanaran.</p>	